现代数学基础丛书 91

发展方程数值计算方法

黄明游 编著



现代数学基础丛书　　91

发展方程数值计算方法

黄明游　编著

科学出版社

内 容 简 介

本书介绍了求发展方程数值解的原理和计算方法，包括将发展方程定解问题离散化的途径、方法，计算格式的设计和求解算法，以及关于数值方法的理论分析．本书内容既保留了那些行之有效的传统方法和经典理论结果，更注重于介绍近几十年来兴起的新方法和传统方法的新发展，反映近几十年来发展方程数值方法的研究与应用方面取得的新进展、新成果．此外，书中列举了若干实际应用问题(多属非线性与耦合问题)．

本书可供计算数学、应用数学、力学等专业的研究生、教师以及从事科学与工程计算应用与研究工作的科技人员参考．

图书在版编目(CIP)数据

发展方程数值计算方法/黄明游编著．—北京：科学出版社，2004
(现代数学基础丛书；91)
ISBN 7-03-012957-1
Ⅰ.发… Ⅱ.黄… Ⅲ.发展方程-数值计算-计算方法 Ⅳ.O175.26
中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 012278 号

责任编辑：吕 虹 张 扬／责任校对：刘小梅
责任印制：钱玉芬／封面设计：陈 敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街16号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com
双青印刷厂 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2004年6月第 一 版 开本：B5(720×1000)
2004年6月第一次印刷 印张：10
印数：1—2 500 字数：180 000

定价：25.00元
(如有印装质量问题，我社负责调换〈环伟〉)

《现代数学基础丛书》序

对于数学研究与培养青年数学人才而言，书籍与期刊起着特殊重要的作用．许多成就卓越的数学家在青年时代都曾钻研或参考过一些优秀书籍，从中汲取营养，获得教益．

20 世纪 70 年代后期，我国的数学研究与数学书刊的出版由于文化大革命的浩劫已经破坏与中断了十余年，而在这期间国际上数学研究却在迅猛地发展着．1978 年以后，我国青年学子重新获得了学习、钻研与深造的机会．当时他们的参考书籍大多还是 50 年代甚至更早期的著述．据此，科学出版社陆续推出了多套数学丛书，其中《纯粹数学与应用数学专著》丛书与《现代数学基础丛书》更为突出，前者出版约 40 卷，后者则逾 80 卷．它们质量甚高，影响颇大，对我国数学研究、交流与人才培养发挥了显著效用．

《现代数学基础丛书》的宗旨是面向大学数学专业的高年级学生、研究生以及青年学者，针对一些重要的数学领域与研究方向，作较系统的介绍．既注意该领域的基础知识，又反映其新发展，力求深入浅出，简明扼要，注重创新．

近年来，数学在各门科学、高新技术、经济、管理等方面取得了更加广泛与深入的应用，还形成了一些交叉学科．我们希望这套丛书的内容由基础数学拓展到应用数学、计算数学以及数学交叉学科的各个领域．

这套丛书得到了许多数学家长期的大力支持，编辑人员也为其付出了艰辛的劳动．它获得了广大读者的喜爱．我们诚挚地希望大家更加关心与支持它的发展，使它越办越好，为我国数学研究与教育水平的进一步提高作出贡献．

杨 乐

2003 年 8 月

前　言

发展方程(evolution equation)是包含时间变数的许多重要的数学物理偏微分方程的统称，又称演化方程或进化方程. 在物理、力学或其他自然科学中，这类方程用来描述随时间而变化的状态或过程. 诸如热传导方程、声波与弹性波方程、反应扩散与对流扩散方程、流体与气体力学方程组、Schrödinger 方程、KdV 方程等以及由这些方程通过适当方式耦合而得到的耦合方程组，皆属于发展方程的范畴.

在科学与技术的发展中提出了种种发展方程的求解问题，然而在绝大多数情形，这些问题的解不能用解析的公式表达出来，或者表达式过于复杂，因而需要采用数值方法去计算它们的近似解. 有限差分法是求解偏微分方程定解问题的传统数值方法，早在 1928 年 Courant,Friedrichs 和 Lewy 便对偏微分方程的差分方法作过完整论述. 第二次世界大战之后，随着快速电子计算机的诞生与发展，差分方法的应用及其理论得到迅猛发展. 20 世纪中、后期发展起来的有限元方法，为偏微分方程(包括发展方程在内)的近似求解增添了又一强有力的工具，尤其对于处理不规则区域上及一般边值条件的偏微分方程定解问题，有限元方法具有显著的优越性. 其次，数值分析家运用 Sobolev 空间及其插值逼近理论为有限元方法建立起了十分完美的数学理论. 此外，在离散 Fourier 变换快速算法提出之后，历史悠久的谱方法也发展成为求解偏微方程的重要方法之一.

近30年来，在上述基本方法的基础上，针对不同类型的发展方程问题(尤其是各种非线性和耦合问题)，探寻可靠的高效、高精度的数值计算方法的努力始终没有间断过，不断地涌现出新的数值方法，如有限体积法和广义差分法、特征和迎风有限元法、间断有限元法等. 值得重视的还有，由我国学者冯康院士 倡导的从几何角度出发寻求发展方程的保结构算法的研究，这是对于构造数值方法的依据和观念上的一个重大革新. 另外，近 20 年来谱与拟谱方法的研究也取得了很大的进展. 发展方程的数值求解问题在科学与工程计算中处于十分重要的地位，已被广泛的应用于气象预报、地震预测、油田的勘测与开发技术、机翼与汽轮机叶片等工业产品设计、生态与环境的动态模拟等领域. 适应现代科学技术的突飞猛进，关于线性与非线性发展方程数值计算方法的研究必将在理论与应用方面得到更加迅速的发展.

本书是在全国数学研究生暑期学校(2002年, 长春)课程“发展方程数值计算方法”讲稿的基础上, 经过充实、改写而成, 它凝聚了作者多年来在吉林大学为研究生开设相关课程时所积累的资料. 在本书中, 我们将通过几类重要并具代表性的发展方程, 介绍求发展方程数值解的原理和计算方法, 以及相关的理论问题. 这里, 包括将发展方程定解问题离散化的途径、方法, 计算格式的设计和求解算法, 以及关于数值方法的理论分析(稳定性、收敛性和误差估计等). 本书基本覆盖了发展方程数值计算方法的主要内容, 既保留了那些行之有效的传统方法和经典理论结果(如求解波动和一阶双曲方程问题的差分方法、关于差分格式收敛性与稳定性的理论), 更注重于介绍近几十年来兴起的新方法(有限元法、有限体积和广义差分法、保结构计算方法等)和传统方法的新发展(基于正交多项式逼近的谱与拟谱方法、人工边界上无反射近似边值条件的构造方法等). 此外, 书中列举了若干实际问题(多属非线性和耦合问题), 以帮助读者了解数值方法是怎样应用的以及其广阔应用前景. 本书力求反映近几十年来发展方程数值方法的研究与应用方面取得的新进展、新成果. 然而, 由于此领域涉及的范围广, 受到篇幅的限制, 不得不在内容方面有所取舍, 会有某些方面的题材没有介绍到. 作者的初衷是编写一本基本反映发展方程数值计算方法全貌的简练教材, 供计算数学与应用数学专业研究生使用, 同时希望本书也能够成为有关科技工作者, 特别是从事科学与工程计算人员所喜爱的参考书之一.

本书吸取了国内外同行的科研成果和他们著作中的部分内容, 在此向他们表示敬意和感谢. 这本书的初稿曾在第八届全国数学研究生暑期学校讲授过, 大部分内容亦在吉林大学的研究生课程中多次讲授过, 这里向对书稿提供宝贵修改意见的同事和学员们表示衷心的感谢. 此外, 也向为本书的排版、校对付出了辛勤劳动的宫成春、尹丽、张凯、徐英祥等同学表示感谢.

由于作者的水平、经验有限, 本书会有许多不足乃至错误, 恳请读者批评、指正.

作　者

2003 年 8 月于吉林大学

目　录

第一章　抛物问题的有限元方法

二阶抛物方程用于描写热的传播、溶质在液体中的弥散、多孔介质中渗流等随时间发展 (演化) 的现象和过程，是一类基本的发展型偏微分方程. 求解抛物方程的初边值问题在科学与工程中有着广泛的应用. 有限差分法可用于并曾经是近似求解抛物问题的数值方法，但在空间区域几何形式或者边值条件比较复杂的情形，该方法显得很笨重并且难于提高方法的精确度. 由于抛物方程的初边值问题与椭圆方程的边值问题之间的密切关系，在近代有限元法诞生并成功的用于求解椭圆方程的边值问题之后，不久便被推广、应用于求解抛物方程的初边值问题，并建立起完善的数学理论. 本章主要介绍求解二阶线性抛物方程初边值问题的有限元方法. §1.1 介绍抛物问题的有关理论知识. §1.2 介绍解初边值问题的 Galerkin 有限元法. §1.3 介绍抛物问题有限元分析的基本方法和理论结果. §1.4 介绍基于一般椭圆逼近的有限元方法.

§1.1　二阶线性抛物方程的初边值问题

设 Ω 是 d 维欧氏空间 $\mathbb{R}^d$ 中的一个有界区域，其边界记为 Γ. 考虑如下二阶线性抛物方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + Au = f(x,t)\ , \qquad x \in \Omega\ , \quad 0 < t \le T, \tag{1.1}$$

其中 A 是由下式给出的一个微分算子

$$Au \equiv -\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{ij}(x)\frac{\partial u}{\partial x_j}\right) + c(x)u,$$

$$a_{ij}(x) = a_{ji}(x)\ , \quad c(x) \ge 0\ .$$

如果下述条件成立，即

$$\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d} a_{ij}(x)\xi_i\xi_j \ge \alpha\sum_{i=1}^{d}|\xi_i|^2\ , \quad \alpha\text{为某一正常数},$$

$$\text{对一切 } x \in \Omega \text{ 和 } \xi \in \mathbb{R}^d\ ,$$

则称 A 为一致强椭圆微分算子，此时 (1.1) 属于抛物型方程. 其次，给定如下 Dirichlet 型边值条件 (齐次)

$$u = 0\ , \qquad \text{当 } x \in \Gamma\ ,\ 0 < t \le T \tag{1.2}$$

和初值条件

$$u(x,0) = u^0(x)\ , \qquad x \in \Omega. \tag{1.3}$$

寻求一个函数 $u(x,t): x\in\overline{\Omega}$, $t\in[0,T]$ 同时满足方程 (1.1) 和条件 (1.2) 、(1.3) 的定解问题称为抛物方程 (1.1) 的一个初边值问题. 除了形如 (1.2) 的边值条件外, 还有形如

$$\left(\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d}a_{ij}n_i\frac{\partial u}{\partial x_j}\right)_{x\in\Gamma}=0$$

或者

$$\left(\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d}a_{ij}n_i\frac{\partial u}{\partial x_j}+\beta u\right)_{x\in\Gamma}=0\,,\qquad \beta\geq 0$$

的第二类和第三类边值条件, 其中 $\underline{n}=(n_1\,,n_2\,,\cdots\,,n_d)$ 代表 Γ 上的单位外法向量.

下面, 引入一些函数空间和记号.

$H=L^2(\Omega)$ 是由定义在 Ω 上的所有平方可积

$$\int_\Omega |v(x)|^2\mathrm{d}x<+\infty$$

的实值可测函数 v 构成的空间. 对于 $u,v\in H$, 定义内积

$$(u,v)=\int_\Omega u(x)v(x)\mathrm{d}x,$$

而 $\|v\|=(v,v)^{\frac{1}{2}}$ 则表示 v 在 H 中的范数. 另外, 定义空间

$$H^k=\{\ v:\ D^\alpha v\in H,\ \ |\alpha|\leq k\},$$

其中 $D^\alpha v=\partial^{|\alpha|}v/\partial x_1^{\alpha_1}\partial x_2^{\alpha_2}\cdots\partial x_d^{\alpha_d}$ 代表函数 $v(x)$ 的 α 阶广义导数, $|\alpha|=\alpha_1+\alpha_2+\cdots+\alpha_d$. H^k 中的内积与范数分别为

$$(v,w)_k=\sum_{|\alpha|\leq k}(D^\alpha v\,,\,D^\alpha w)\,,\qquad \|v\|_k=(v,v)_k^{\frac{1}{2}}.$$

在广义函数论中, 称 H^k 是指数为 k 的 Sobolev 空间.

另外, 用记号 $C(0,T;X)$ 表示映射族 $\{v(t):(0,T)\to X\}$, 其中任一 $v(t)$ 关于 $t\in(0,T)$ 按空间 X 的度量是连续的. 类似的记号还有 $L^2(0,T;X)$, $L^\infty(0,T;X)$ 等, 无需再解释.

关于初边值问题 (1.1)~(1.3) 的解的存在性和正则性, 有如下结果 (参看 [4]) :

定理 1.1 *假定*

$$u^0\in H^{s+1},\qquad f\in L^2(0,T;H^s)\,,\quad s\geq 0\text{为整数},$$

则初边值问题 (1.1)~(1.3) 存在惟一的解 $u(x,t)$, 满足

$$u\in L^2(0,T;H^{s+2}),\qquad u_t\in L^2(0,T;H^s)$$

和估计式

$$\int_0^t \sum_{|\alpha|=2} \|D^\alpha u(\cdot,\tau)\|_{H^s}^2 \,\mathrm{d}\tau \le C_0 \left(\|u^0\|_{H^{s+1}}^2 + \int_0^t \|f(\cdot,\tau)\|_{H^s}^2 \,\mathrm{d}\tau \right).$$

考虑相应的齐次问题:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + Au = 0\,, & x \in \Omega\,, \quad s < t < +\infty, \\ u = 0\,, & x \in \Gamma\,, \\ u(x,s) = u^s(x)\,. \end{cases} \tag{1.4}$$

显然, 此问题的解仅仅依赖于在 $t = s$ 时刻指定的初值 u^s, 记为 $u(t) = E(t,s)u^s$, $t \in [\,s\,,+\infty)$, 称 $E(t,s)$ 为问题 (1.4) 的基本解算子, 它具有性质:

$$E(s,s) = I, \qquad \text{单位算子},$$

$$E(t,\tau)\cdot E(\tau,s) = E(t,s)\,, \qquad \text{当} \quad 0 \le s \le \tau \le t\,.$$

借助算子 $E(t,s)$, 由叠加原理可将非齐次问题 (1.1)~(1.3) 的解表示为 (Duhamel 公式):

$$u(t) = E(t,0)u^0 + \int_0^t E(t,\tau)f(\tau)\,\mathrm{d}\tau. \tag{1.5}$$

关于算子 $E(t,s)$ 可证明下列估计: 对于任意 $k\,,l \ge 0$, 成立

$$\|E(t,s)v\|_k \le C(t-s)^{-\frac{k}{2}}\|v\|, \qquad \text{当}\ 0 \le s < t < +\infty \text{时},$$

$$\left\| \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)^l E(t,s)v \right\| \le C(t-s)^{-l}\|v\|, \qquad \text{当}\ 0 \le s < t < +\infty \text{时}.$$

由此可看出: 当 $f = 0$ 时, 问题 (1.1)~(1.3) 的解 $u(x,t)$ 当 $t \to +\infty$ 时是衰减的.

§1.2 Galerkin 有限元法 (半离散近似)

本节讨论抛物方程初边值问题 (1.1)~(1.3) 的 Galerkin 有限元近似 (空间变量的离散化). 首先, 借助虚功原理将问题改写成变分形式.

记 $H_0^1 = \{v \in H^1 : v = 0 \text{ 当 } x \in \Gamma\}$. 设 $f \in C(0,T;H)$, 用函数 $v(x) \in H_0^1$ 与方程 (1.1) 的两端作内积, 有

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}, v\right) + (Au, v) = (f, v).$$

利用 Green 公式,

$$(Au,v) = \int_\Omega \left(\sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{d} a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} + cuv \right) \mathrm{d}x - \int_\Gamma \left(\sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{d} a_{ij} n_i \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) v \, \mathrm{d}x,$$

因 $v=0$ 当 $x\in\Gamma$, 故上式右端第二项为零. 引进双线性泛函

$$a(u,v) = \int_\Omega \left(\sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{d} a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} + cuv \right) \mathrm{d}x \ , \tag{1.6}$$

那么可得如下方程:

$$\begin{cases} \left(\dfrac{\partial u}{\partial t}, v \right) + a(u,v) = (f,v), \quad \forall\, v \in H_0^1, \\ u(\cdot,0) = u^0(\cdot), \end{cases} \tag{1.7}$$

我们称方程 (1.7) 为问题 (1.1)~(1.3) 的变分 (弱) 形式. 显然, 初边值问题 (1.1)~(1.3) 的解 u 必定满足 (1.7), 而问题 (1.7) 的解 $u(t):[0,T]\to H_0^1$ 则称为原问题 (1.1)~(1.3) 的弱解, 它被视作一个从 $\overline{I}=[0,T]$ 到空间 H_0^1 的映射.

由假设: $a_{ij}=a_{ji}$ 和定义式 (1.6), 对任意 $u,v\in H^1$, $a(u,v)=a(v,u)$, 即 $a(\cdot,\cdot)$ 是对称的双线性泛函. 另外, 根据关于算子 A 是一致强椭圆微分算子的假设, 可知存在常数 $\gamma>0$, 使得

$$a(v,v) \ge \gamma \|v\|_1^2 \ , \qquad \forall\, v \in H_0^1, \tag{1.8}$$

即 $a(\cdot,\cdot)$ 在空间 H_0^1 上是正定的. 从 $a(\cdot,\cdot)$ 的定义还可看出, 当 $a_{ij}(x)$, $c(x)\in C(\overline{\Omega})$ 时, 便有

$$|a(u,v)| \le M \|u\|_1 \|v\|_1 \ , \qquad \forall\, u,v \in H^1, \tag{1.9}$$

其中 M 为某一正常数.

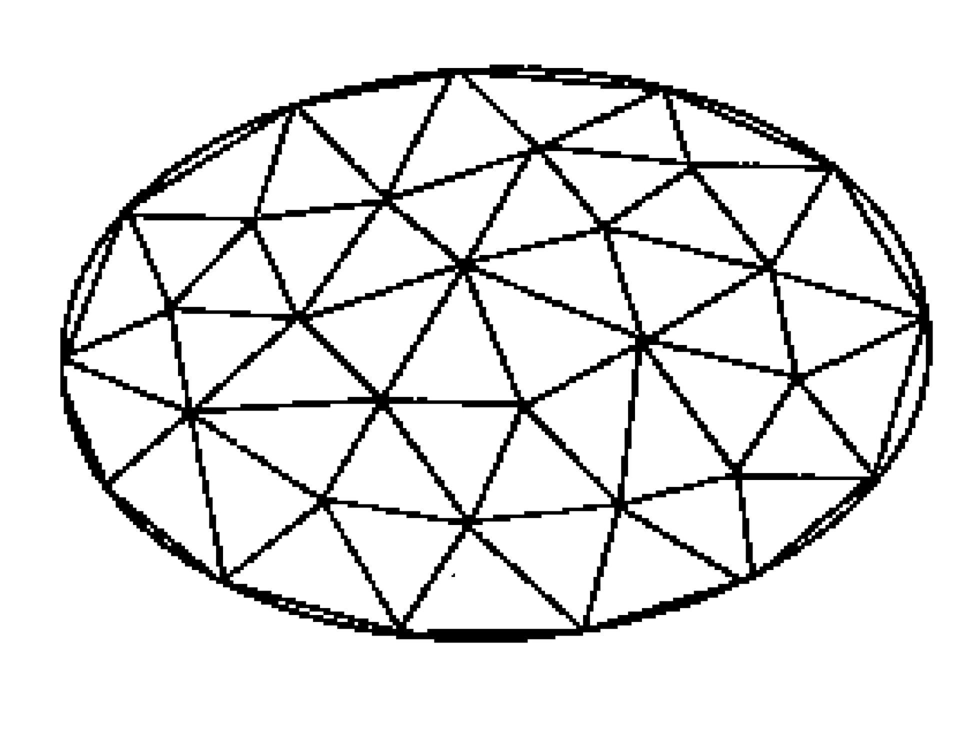


图 1.1

有限元近似的第一步, 是将求解空间区域 Ω 剖分成有限个互不重叠的子区域 (称为 **元素** 或 **单元**) 的集合. 例如, 图 1.1 所示是一个二维区域 Ω 的由三角形单元构成的剖分. 用 h 表示剖分中单元的最大直径, 记相应的剖分为 $\mathcal{J}_h$, $\{\mathcal{J}_h, 0<h<h_0\}$ 代表一个剖分族, 当 h 减小时, 剖分就愈来愈细. 以 $\rho(K)$ 和 $\sigma(K)$ 分别表示 $\mathcal{J}_h$ 中单元 K 的外接圆和内切圆的直径. 如果存在不依赖于 h 的常数 C, 使得

$$\rho(K)/\sigma(K) \le C,$$

则称剖分族 $\{\mathcal{J}_h, 0 < h < h_0\}$ 是 **正则的**(regular).

有限元近似的第二步，是构造 H_0^1 的一族有限维子空间 $\{S_h, 0 < h < h_0\}$, 要求它具有如下逼近性质：对于某一整数 $r \geq 2$, 有

$$\inf_{v_h \in S_h} \{ \|v - v_h\| + h\|v - v_h\|_1 \} \leq Ch^s\|v\|_s, \ 1 \leq s \leq r,$$
$$\text{对任意 } v \in H^s \cap H_0^1. \tag{1.10}$$

通常，S_h 是通过在剖分 $\mathcal{J}_h$ 上作分片多项式插值的方法去构造的. 由 Sobolev 空间插值理论 (参见 [1], § 3.1) 可知，当剖分族 $\{\mathcal{J}_h, 0 < h < h_0\}$ 为正则时，由 $\mathcal{J}_h$ 上所有属于 $C(\Omega)$ 的、次数 $\leq r-1$ 的分片多项式组成的子空间 S_h 满足条件 (1.10).

在取定有限元空间 $S_h \subset H_0^1$ 后，初边值问题 (1.1)~(1.3) 的有限元近似定义为：求映射 $u_h(t) : \bar{I} = [0, T] \to S_h$, 它满足

$$\begin{cases} (\dfrac{\partial u_h}{\partial t}, v_h) + a(u_h, v_h) = (f, v_h), \quad \forall\, v_h \in S_h, \\ u_h(0) = u_h^0, \end{cases} \tag{1.11}$$

其中 $u_h^0 \in S_h$ 是函数 $u^0(x)$ 的某个近似. 这里，我们看到问题 (1.11) 是变分问题 (1.7) 的一种近似.

设 $\{\phi_j(x)\}_{j=1}^{N_h}$ 是空间 S_h 的一个基底, 则近似问题 (1.11) 又可以表述为：求函数表达式

$$u_h(x,t) = \sum_{j=1}^{N_h} \alpha_j(t)\phi_j(x)$$

即确定其中系数 $\{\alpha_j(t)\}_{j=1}^{N_h}$, 使得

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{j=1}^{N_h} \dot{\alpha}_j(t)(\phi_j, \phi_i) + \sum_{j=1}^{N_h} \alpha_j(t)a(\phi_j, \phi_i) = (f, \phi_i), \\ \qquad i = 1, 2, \cdots, N_h, \\ \alpha_j(0) = r_j, \qquad j = 1, 2, \cdots, N_h, \end{cases} \tag{1.12}$$

其中 $\dot{\alpha}_j = \dfrac{\mathrm{d}\alpha_j}{\mathrm{d}t}$, r_j 为 $u_h^0(x) = \displaystyle\sum_{j=1}^{N_h} r_j\phi_j(x)$ 的系数. 可以看出，(1.12) 是以 $\{\alpha_j(t)\}_{j=1}^{N_h}$ 为未知函数的一个一阶常微分方程组. 由于这里时间变量 t 仍然是一个连续变量，所以说 (1.12) 是问题 (1.7) 的一个半离散近似.

引进矩阵记号:

$$\begin{aligned}
&M=(m_{ij})_{N_h\times N_h}, \quad m_{ij}=(\phi_i,\phi_j),\\
&B=(b_{ij})_{N_h\times N_h}, \quad b_{ij}=a(\phi_i,\phi_j),\\
&\alpha(t)=(\alpha_1(t),\alpha_2(t),\cdots,\alpha_{N_h}(t))^{\mathrm{T}},\\
&F=(f_1,f_2,\cdots,f_{N_h})^{\mathrm{T}}, \quad f_i=(f,\phi_i),\\
&r=(r_1,r_2,\cdots,r_{N_h})^{\mathrm{T}},
\end{aligned}$$

其中 M 是一个 Gram 矩阵, 称为"质量矩阵", 它是非奇异的, 故 M^{-1} 存在. 利用上述记号, 半离散问题 (1.12) 又可以写成

$$\begin{cases}
\dot{\alpha}(t)+M^{-1}B\alpha(t)=M^{-1}F\ , \quad 0<t\leq T,\\
\alpha(0)=r.
\end{cases} \tag{1.13}$$

由常微理论可知, 初值问题 (1.13) 对于任意 F 和 r 存在惟一的解 $\alpha(t)$, 从而近似问题 (1.11) 存在惟一解 $u_h(x,t)$.

最后补充一点, 即当初边值问题中的边值条件不是 Dirichlet 型条件时, 那么需要适当的修改变分陈述. 例如, 在边值条件属于第三类条件:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial\nu}+\beta u\right)_{x\in\Gamma}=0\ , \qquad \beta\geq 0, \tag{1.14}$$

$$\frac{\partial u}{\partial\nu}=\sum_{j=1}^{d}\nu_j\frac{\partial u}{\partial x_j}\ , \qquad \nu_j=\sum_{i=1}^{d}a_{ij}n_i$$

的情形, 变分陈述 (1.7) 中的 $a(\cdot,\cdot)$ 应当修改为

$$\begin{aligned}
a(u,v)=&\int_\Omega\left(\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d}a_{ij}\frac{\partial u}{\partial x_j}\frac{\partial v}{\partial x_i}+cuv\right)\mathrm{d}x\\
&+\int_\Gamma\beta uv\,\mathrm{d}s,
\end{aligned} \tag{1.15}$$

并且尚需将其中的空间 H_0^1 改换为 H^1.

注 (1.14) 中的 $\underline{\nu}=(\nu_1,\nu_2,\cdots,\nu_d)$ 称为 Γ 上的单位拟法向量.

§1.3 收敛性分析与误差估计

本节介绍抛物问题有限元法的理论分析方法, 将通过能量估计法证明有限元法的收敛性和近似解的误差估计式.

首先，介绍与抛物问题 (1.1)~(1.3) 相关的伴随椭圆边值问题. 考虑如下边值问题：

$$\begin{cases} -\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{ij}(x)\frac{\partial w}{\partial x_j}\right)+c(x)\,w=f\;, & x\in\Omega, \\ w=0\;, \quad x\in\Gamma\;. \end{cases} \tag{1.16}$$

当 f 不依赖于 t, 则 (1.16) 的解 $w(x)$ 可视作初边值问题 (1.1)~(1.3) 的定常解，也就是说，如果 (1.1)~(1.3) 的解 $u(x,t)$ 在 $t\to+\infty$ 时存在极限，那么

$$\lim_{t\to+\infty} u(x,t)=w(x)\;.$$

一般地，称 (1.16) 为抛物问题 (1.1)~(1.3) 的伴随椭圆问题.

利用 §1.2 中的有限元空间 $S_h\subset H_0^1$, 可以定义边值问题 (1.16) 的一个有限元近似：求 $w_h\in S_h$, 使得

$$a(w_h,v_h)=(f,v_h)\;,\qquad \forall\, v_h\in S_h, \tag{1.17}$$

其中 $a(\cdot,\cdot)$ 是 §1.2 中所定义的双线性泛函. 因 $a(\cdot,\cdot)$ 是正定的，由 Lax-Milgram 定理 (见 [3]) 可知，有限元方程 (1.17) 存在惟一的解 $w_h\in S_h$.

引理 1.1 *假定空间 S_h 具有逼近性质 (1.10), 边值问题 (1.16) 的解 $w\in H^s\cap H_0^1$, 则由 (1.17) 所定义的近似解 w_h 是收敛的，并满足*

$$\|w_h-w\|+h\|w_h-w\|_1\le Ch^s\|w\|_s,\qquad 1\le s\le r\;. \tag{1.18}$$

证明 显然，(1.16) 的解 w 满足

$$a(w,v_h)=(f,v_h)\;,\qquad \forall\, v_h\in S_h,$$

由此式与 (1.17) 相减可得

$$a(w-w_h,v_h)=0\;,\qquad \forall\, v_h\in S_h. \tag{1.19}$$

于是，利用 $a(\cdot,\cdot)$ 所满足的假定条件 (1.8) 和 (1.9) (见 §1.2), 有：对任意 $v_h\in S_h$,

$$\gamma\|w_h-w\|_1^2\le a(w_h-w,w_h-w)=a(w_h-w,v_h-w)$$

$$\le M\|w_h-w\|_1\|v_h-w\|_1.$$

消去上式两端公共因子并由 S_h 的逼近性质 (1.10), 便知

$$\|w_h-w\|_1\le\frac{M}{\gamma}\inf_{v_h\in S_h}\|v_h-w\|_1\le Ch^{s-1}\|w\|_s\;. \tag{1.20}$$

为进一步估计 $\|w_h-w\|$, 令 $\Psi=\Psi(x)$ 为下述辅助问题的解

$$\begin{cases} -\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{ij}\frac{\partial \Psi}{\partial x_j}\right)+c\Psi=\phi(x)\,, & x\in\Omega, \\ \Psi=0\,, & x\in\Gamma. \end{cases} \tag{1.21}$$

已知, 对任意 $\phi\in L^2(\Omega)$, 问题 (1.21) 存在惟一的解 $\Psi(x)\in H^2(\Omega)$ 并有估计:

$$\|\Psi\|_2\le C\|\phi\| \qquad (\text{椭圆方程的正则性}). \tag{1.22}$$

由 (1.19), 可知, 对任意 $v_h\in S_h$,

$$\begin{aligned}(w_h-w,\phi)&=(w_h-w,A\Psi)=a(w_h-w,\Psi)\\ &=a(w_h-w,\Psi-v_h)\le M\|w_h-w\|_1\|\Psi-v_h\|_1.\end{aligned}$$

从而, 由 (1.20) 和 S_h 的逼近性质, 得到

$$\begin{aligned}(w_h-w,\phi)\ &\le Ch^{s-1}\|w\|_s\inf_{v_h\in S_h}\|\Psi-v_h\|_1\\ &\le Ch^s\|w\|_s\|\Psi\|_2\le Ch^s\|w\|_s\|\phi\|,\end{aligned}$$

由此推出

$$\|w_h-w\|=\sup_{0\ne\phi\in L^2(\Omega)}\frac{(w_h-w,\phi)}{\|\phi\|}\le Ch^s\|w\|_s,$$

至此定理证毕. 上面关于 w_h-w 的 L^2 范数的估计方法就是著名的 "尼采 (Nitsche) 技巧".

引理 1.2 (Gronwall 不等式) 设 $y(t)$ 于 $[0,T)$ 上连续并满足

$$y(t)\le y_0+\int_0^t\lambda(\tau)y(\tau)d\tau, \tag{1.23}$$

其中 $\lambda(\tau)\ge 0$ 且 $\lambda(\tau)\in L^1(0,T)$, 则

$$y(t)\le y_0\exp\left(\int_0^t\lambda(\tau)d\tau\right). \tag{1.24}$$

证明 令 $Y(t)=\int_0^t\lambda(\tau)y(\tau)d\tau$. 由 (1.23), 有

$$Y'(t)\le\lambda(t)y_0+\lambda(t)Y(t),$$

此式两端乘以 $\exp\left(-\int_0^t\lambda(\tau)d\tau\right)$ 后得到

$$\begin{aligned}\left[Y(t)\exp\left(-\int_0^t\lambda(\tau)d\tau\right)\right]'&\le\lambda(t)y_0\exp\left(-\int_0^t\lambda(\tau)d\tau\right)\\ &=-y_0\left[\exp\left(-\int_0^t\lambda(\tau)d\tau\right)\right]'.\end{aligned}$$

由上式积分并注意到 $Y(0)=0$, 进而有

$$Y(t)\le y_0\exp\left(\int_0^t\lambda(\tau)d\tau\right)-y_0,$$

将它代入 (1.23) 即得估计式 (1.24).

现在开始讨论抛物问题 Galerkin 有限元法 (半离散近似) 的一些理论性质. 首先, 对于半离散非齐次方程 (1.11) 证明其解所满足的一个先验估计式.

定理 1.2 *半离散方程 (1.11) 的解 $u_h(t),0\le t\le T$ 满足*

$$\|u_h(t)\|+\gamma\int_0^t\|u_h(\tau)\|_1d\tau\le\|u_h(0)\|+\int_0^t\|f(\tau)\|d\tau. \tag{1.25}$$

证明 在方程 (1.11) 中取 $v_h=u_h$, 可得

$$\|u_h(t)\|\frac{d}{dt}\|u_h(t)\|+a(u_h(t),u_h(t))\le\|u_h(t)\|\|f(t)\|.$$

注意到 $a(u_h,u_h)\ge\gamma\|u_h(t)\|_1^2\ge\gamma\|u_h(t)\|_1\|u_h(t)\|$, 消去上式两端的公共因子, 即得

$$\frac{d}{dt}\|u_h(t)\|+\gamma\|u_h(t)\|_1\le\|f(t)\|,$$

再对 t 积分上式, 即证定理的估计式.

估计式 (1.25) 表明了半离散问题 (1.11) 的适定性. 特别地, 对于齐次抛物方程 ($f=0$ 情形), 由定理 1.2 可知: $\|u_h(t)\|\le\|u_h(0)\|,\forall t>0$, 即半离散齐次方程的解在 $L^2(\Omega)$ 范数意义下是稳定的.

关于非齐次半离散问题 (1.11) 的解的误差估计, 有如下基本结果.

定理 1.3 *假定空间 $\{S_h,0<h<h_0\}$ 具有逼近性质 (1.10), 并且近似初值 u_h^0 满足*

$$\|u_h^0-u^0\|\le Ch^r\|u^0\|_r, \tag{1.26}$$

则半离散问题 (1.11) 的解 $u_h(t)$ 满足

$$\|u_h(t)-u(t)\|\le Ch^r\{\|u^0\|_r+\int_0^t\|u_t(\tau)\|_rd\tau\}. \tag{1.27}$$

(这里, 为使估计式有意义, 需要假设真解具有一定的正则性, 如保证右端的积分项是有界的.)

证明 作为比较, 引进真解 $u(t)$ 的椭圆投影 $P_1u(t)\in S_h$, 它由下式定义

$$a(P_1u,v_h)=a(u,v_h),\ \ \forall v_h\in S_h, \tag{1.28}$$

(由 Lax-Milgram 定理，P_1u 是惟一确定的). 现令 $u_h - u = (u_h - P_1u) + (P_1u - u) = \theta_h + \eta$, 其中 $\theta_h \in S_h$. 由引理 1.1,

$$\begin{aligned}\|\eta(t)\| &= \|P_1u(t) - u(t)\| \le Ch^r\|u(t)\|_r \\ &= Ch^r\|u^0 + \int_0^t u_t(\tau)d\tau\|_r \\ &\le Ch^r\{\|u^0\|_r + \int_0^t \|u_t(\tau)\|_r d\tau\}.\end{aligned} \tag{1.29}$$

再来估计 $\|\theta_h(t)\|$. 注意到，对任意 $v_h \in S_h$,

$$\begin{aligned}&(\theta_{h,t}, v_h) + a(\theta_h, v_h) \\ &= (u_{h,t}, v_h) + a(u_h, v_h) - (P_1u_t, v_h) - a(P_1u, v_h) \\ &= (f, v_h) - (P_1u_t, v_h) - a(u, v_h) \\ &= (u_t, v_h) - (P_1u_t, v_h),\end{aligned}$$

可见，$\theta_h(t)$ 满足方程

$$(\theta_{h,t}, v_h) + a(\theta_h, v_h) = -(\eta_t, v_h),\ \forall v_h \in S_h. \tag{1.30}$$

在 (1.30) 中取得 $v_h = \theta_h$, 得到

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|\theta_h\|^2 + a(\theta_h, \theta_h) = -(\eta_t, \theta_h) \le \|\eta_t\| \cdot \|\theta_h\|.$$

因$a(\theta_h, \theta_h) \ge 0$, 故有

$$\frac{d}{d\tau}\|\theta_h(\tau)\| \le \|\eta_t(\tau)\|.$$

将上式从 0 到 t 积分，可得

$$\|\theta_h(t)\| \le \|\theta_h(0)\| + \int_0^t \|\eta_t(\tau)\| d\tau. \tag{1.31}$$

根据引理 1.1 和假设 (1.26), 有

$$\|\theta_h(0)\| = \|u_h^0 - P_1u^0\| \le \|u_h^0 - u^0\| + \|u^0 - P_1u^0\| \le Ch^r\|u^0\|_r$$

$$\|\eta_t(\tau)\| = \|P_1u_t(\tau) - u_t(\tau)\| \le Ch^r\|u_t(\tau)\|_r,$$

将它们代入 (1.31), 又得

$$\|\theta_h(t)\| \le Ch^r\{\|u^0\|_r + \int_0^t \|u_t(\tau)\|_r d\tau\}. \tag{1.32}$$

最后，定理的估计式 (1.25) 可由 (1.29) 和 (1.32) 通过三角不等式导出.

定理 1.4 (H^1- 估计) 当 S_h 具有逼近性质 (1.10) 并且近似初值 u_h^0 满足

$$\|u_h^0 - u^0\|_1 \le Ch^{r-1}\|u^0\|_r \tag{1.33}$$

时，由 (1.11) 所定义的近似解 $u_h(t)$ 满足

$$\|u_h(t) - u(t)\|_1 \le Ch^{r-1}\left\{\|u^0\|_r + \|u(t)\|_r + \left(\int_0^t \|u_t(\tau)\|_{r-1}^2 d\tau\right)^{\frac{1}{2}}\right\}. \tag{1.34}$$

证明 仍令 $u_h(t) = \theta_h(t) + \eta(t)$. 由引理 1.1, 有

$$\|\eta(t)\|_1 = \|P_1 u(t) - u(t)\|_1 \le Ch^{r-1}\|u(t)\|_r.$$

其次，在方程 (1.30) 中取 $v_h = \theta_{h,t}$, 可得

$$\|\theta_{h,t}\|^2 + \frac{1}{2}\frac{d}{dt}a(\theta_h, \theta_h) = -(\eta_t, \theta_{h,t}) \le \frac{1}{2}\|\theta_{h,t}\|^2 + \frac{1}{2}\|\eta_t\|^2$$

或者

$$\frac{d}{dt}a(\theta_h, \theta_h) \le \|\eta_t\|^2,$$

对 t 积分后，得到

$$a(\theta_h(t), \theta_h(t)) \le a(\theta_h(0), \theta_h(0)) + \int_0^t \|\eta_t(\tau)\|^2 d\tau.$$

于是，有

$$\gamma\|\theta_h(t)\|_1^2 \le a(\theta_h(t), \theta_h(t)) \le M\|\theta_h(0)\|_1^2 + \int_0^t \|\eta_t(\tau)\|^2 d\tau.$$

另外，有估计

$$\|\theta_h(0)\|_1 \le \|u_h^0 - u^0\|_1 + \|u^0 - P_1 u^0\|_1 \le Ch^{r-1}\|u^0\|_r,$$

$$\|\eta_t(\tau)\| = \|P_1 u_t(\tau) - u_t(\tau)\| \le Ch^{r-1}\|u_t(\tau)\|_{r-1}.$$

综合以上估计，即可证定理估计式 (1.34).

下面，为了说明由 Galerkin 有限元法所得半离散模型与原连续模型的相似和逼近性质，我们特地对齐次抛物方程的逼近问题作进一步的讨论.

考虑齐次抛物问题：

$$\begin{cases} u_t + Au = 0, & x \in \Omega, 0 < t < +\infty, \\ u = 0, & x \in \Gamma, \\ u(x,0) = u^0, & x \in \Omega, \end{cases} \tag{1.35}$$

其中算子 A 和相应的双线性泛函见 §1.2. 此问题的 Galerkin 近似 (半离散模型) 为:

$$\begin{cases} (u_{h,t}, v_h) + a(u_h, v_h) = 0, \quad \forall v_h \in S_h,\ t > 0, \\ u_h(0) = u_h^0. \end{cases} \tag{1.36}$$

与连续模型 (1.35) 类似, 问题 (1.36) 的解 $u_h(t)$ 仅仅依赖于 $t=0$ 时刻指定的初值 u_h^0, 记为 $u_h(t) = E_h(t,0)u_h(0)$, 并记 $u_h(t) = E_h(t,s)u_h(s)$, 对于 $0 \le s \le t < +\infty$, 称 $\{E_h(t,s) : 0 \le s \le t < +\infty\}$ 为半离散抛物问题 (1.11) 的解算子, 利用它可将该问题的解表示为

$$u_h(t) = E_h(t,0)u_h^0 + \int_0^t E_h(t,s)P_0 f(s)ds, \tag{1.37}$$

其中 P_0 是从 $L^2(\Omega)$ 到其子空间 S_h 上的投影算子. (1.37) 可视为 §1.1 节中 Duhamel 公式的离散形式. 由定理 1.2 推知

$$\|E_h(t,s)v_h\| \le \|v_h\|,\ \forall v_h \in S_h, 0 \le s \le t. \tag{1.38}$$

从上面看到, $E_h(t,s)$ 与连续型算子 $E(t,s)$(见 §1.1) 具有许多相似的性质. 另外, 不难看出, 齐次问题 (1.35) 的 Galerkin 近似 (1.36), 实际上就是用 $E_h(t,s)$ 作为解算子 $E(t,s)$ 的离散近似. 不妨设 $u_h^0 = P_0u^0$, 那么 $u_h(t) = E_h(t,0)P_0u^0$. 引进误差算子

$$F_h(t,s) = E_h(t,s)P_0 - E(t,s),$$

则有误差表达式 $e(t) = u_h(t) - u(t) = F_h(t,0)u^0$. 已知, $\|E(t,s)\|, \|E_h(t,s)\| \le 1$, 故知 $F_h(t,s)$ 为一致有界算子: 对任意 $v \in L^2(\Omega)$,

$$\|F_h(t,s)v\| \le \|v\|,\ \ 0 \le s \le t < +\infty.$$

进一步的分析, 可以证明 (见 [7] 或 [2]): 当 $\{S_h, 0 < h < h_0\}$ 具有性质 (1.10) 时, 如下估计式成立:

$$\|F_h(t,s)v\| \le Ch^r(t-s)^{-\frac{r}{2}}\|v\|,\ \ 0 \le s < t < +\infty. \tag{1.39}$$

由估计式 (1.39), 我们可以得到关于齐次抛物问题 (1.35) 半离散近似解的一个误差估计.

定理 1.5 *假设 $u^0 \in L^2(\Omega), u_h^0 = P_0u^0$, 并且 $\{S_h, 0 < h < h_0\}$ 具有性质 (1.10), 则由 (1.36) 所定义的半离散近似解 $u_h(t) = E_h(t,0)P_0u^0$ 满足*

$$\|u_h(t) - u(t)\| \le Ch^r t^{-\frac{r}{2}}\|u^0\|,\ \ 0 < t < +\infty. \tag{1.40}$$

在此定理中，关于初值仅仅要求 $u^0 \in L^2(\Omega)$, 被称作非光滑初值，所得估计式 (1.40) 的右端出现负幂 $t^{-\frac{r}{2}}$ 因子. 尽管如此，定理表明对于 $t>0$, 半离散问题 (1.36) 的解仍然具有最佳阶的收敛速度.

我们看到，上面给出的误差估计式 (1.40) 的右端仅出现问题 (1.35) 的初值，没有用到真解及其导数去表示误差界限. 对于具有光滑初值的齐次抛物问题，同样地可建立明显依赖于初值的误差估计式.

定理 1.6 假定 $u^0 \in H^r(\Omega)$ 并满足协调条件：

$$(u^0)_j \in H^{r-2j}(\Omega) \cap H_0^1(\Omega),\ \ j = 0, 1, \cdots, \left[\frac{r}{2}\right],$$

其中 $(u^0)_j = -A(u^0)_{j-1}$, $j = 1, 2, \cdots, (u^0)_0 = u^0$, 并设 $\{S_h, 0 < h < h_0\}$ 具有性质 (1.10), 则 (1.36) 的解 $u_h(t)$ 满足：

$$\|u_h(t) - u(t)\| \le Ch^r \|u^0\|_r,\ \ 0 < t < +\infty, \tag{1.41}$$

(证明见 [6]).

最后，对半离散问题 (1.11) 中初值 u_h^0 的选法作一点说明. $u_h^0 \in S_h$ 有以下选取方法：

1^0. 取 u_h^0 为 u^0 在子空间 S_h 上的 L^2 投影，即令 $u_h^0 = P_0u^0$, 它由下式惟一确定

$$(P_0u^0, v_h) = (u^0, v_h),\ \ \forall v_h \in S_h. \tag{1.42}$$

2^0. 当 S_h 是由剖分 J_h 上的分片插值多项式组成时，那么 u_h^0 可取为 $u^0(x)$ 在 S_h 中的插值函数，记作 $P_Iu^0 \in S_h$.

3^0. 取 u_h^0 为 u^0 在 S_h 中的椭圆投影，即令 $u_h^0 = P_1u^0$, 它由下式惟一确定

$$a(P_1u^0, v_h) = a(u^0, v_h),\ \ \forall v_h \in S_h. \tag{1.43}$$

由上面所述方法选取的近似初值 u_h^0 皆满足定理 1.3 和定理 1.4 的要求，即

$$\|u_h^0 - u^0\|_s \le Ch^{r-s}\|u^0\|_r,\ \ s = 0, 1.$$

§1.4 基于一般椭圆逼近的方法

前两节讨论的 Galerkin 有限元法，要求有限元近似空间 $S_h \subset H_0^1(\Omega)$, 即 S_h 中的函数必需满足边值条件：在 $\Gamma = \partial\Omega$ 上恒等于零. 当 Ω 为带曲边界的区域时，构造满足上述要求的空间 S_h 是比较难的. 为了克服这一困难，人们提出了种种修正的 Galerkin 有限元，如拉氏乘子法 [8] 、插值边界条件法 [9] 和 Nitsche 方法 [10] 等. 这些方法的共同特点是仅仅要求近似空间 $S_h \subset H^1(\Omega)$, 解除了在 Γ 上恒为零的限制. 本节介绍如何将这些方法应用到抛物问题.

本节考虑如下含低阶微商项的二阶线性抛物方程的初边值问题:

$$\begin{cases} u_t + Au = f(x,t), & x \in \Omega, 0 < t \le t^*, \\ u = 0, & x \in \Gamma = \partial\Omega, 0 < t \le t^*, \\ u(x,0) = u^0(x), & x \in \Omega, \end{cases} \tag{1.44}$$

其中

$$Au \equiv -\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{ij}(x)\frac{\partial u}{\partial x_j}\right) + \sum_{j=1}^{d} b_j(x)\frac{\partial u}{\partial x_j} + c(x)u, \tag{1.45}$$

$$a_{ij}(x) = a_{ji}(x),\ c(x) \ge 0.$$

引进与算子 A 相应的双线性泛函

$$a(u,v) = \int_\Omega \left(\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d} a_{ij}\frac{\partial u}{\partial x_j}\frac{\partial v}{\partial x_i} + cuv\right)dx + \int_\Omega \sum_{j=1}^{d} b_j \frac{\partial u}{\partial x_j} v dx. \tag{1.46}$$

这里, 由于低阶微商项 $\sum_{j=1}^{d} b_j \frac{\partial u}{\partial x_j}$ 的出现, 算子 A 和双线性泛函 $a(\cdot,\cdot)$ 不再具有自伴 (对称) 性质, 不过我们仍然假定算子 A 为一致强椭圆微分算子, 即存在常数 $\gamma > 0$, 使得

$$a(u,u) \ge \gamma \|u\|_1^2,\ \ \forall u \in H_0^1(\Omega). \tag{1.47}$$

这样一来, 上述一般抛物方程的初边值问题 (1.44) 的变分形式同样地可写成

$$\begin{cases} (u_t, v) + a(u,v) = (f,v), & \forall v \in H_0^1(\Omega), \\ u(x,0) = u^0(x). \end{cases} \tag{1.48}$$

对任给 $f \in L^2(\Omega)$, 定义 $w = Tf \in H_0^1(\Omega)$ 为下述椭圆变分问题的解:

$$a(w,v) = (f,v),\ \ \forall v \in H_0^1(\Omega). \tag{1.49}$$

利用算子 $T: L^2(\Omega) \to H_0^1(\Omega)$, 可将抛物方程 (1.44) 改写成

$$Tu_t + u = Tf,\ u(0) = u^0. \tag{1.50}$$

假定已经选定求解椭圆问题 (1.49) 的一个有限元法, 也就是说: 给定了一族有限维函数空间 $\{S_h, 0 < h < h_0\}$, 和一族算子 $\{T_h, 0 < h < h_0\}$, 其中 $T_h: L^2(\Omega) \to S_h$ 为算子 T 的近似算子. 由此, 我们可以定义抛物问题 (1.44) 的一个半离散近似: 求映射 $u_h(t): I = [0,\infty) \to S_h$ 使得

$$T_h u_{h,t} + u_h = T_h f,\ \ u_h(0) = u_h^0, \tag{1.51}$$

其中 $u_h^0 \in S_h$ 是 u^0 的某一近似. 为了确保 (1.51) 的解 $u_h(t)$ 具有满意的收敛性质, 自然要对 $\{T_h, 0<h<h_0\}$ 附加一定的条件. 同时, 我们还希望"假设条件"尽量的少, 以便将常见的那些方法能够包括在内.

以下, 我们假定 $\{T_h, 0<h<h_0\}$ 满足下列条件:

(ia) $(f, T_h f) \geq 0$, 对任意 $f \in L^2(\Omega)$, 并且 $(v_h, T_h v_h) > 0$, 对所有 $0 \neq v_h \in S_h$;

(ib) $|(T_h f, g) - (f, T_h g)| \leq C(f, T_h f)^{\frac{1}{2}} \|T_h g\|$, 对任意 $f, g \in L^2(\Omega)$;

(ii) 存在正整数 $r \geq 2$, 使得

$$\|(T_h - T)f\| \leq Ch^s \|f\|_{s-2},\ 2 \leq s \leq r.$$

首先, 我们就几个较为重要的例子来检验上述假定条件, 以说明这个理论分析框架的适用性.

例 1.1 Galerkin 有限元法. 这里 $S_h \subset H_0^1(\Omega)$, 相应的椭圆近似算子 T_h 由下式定义:

$$a(T_h f, v_h) = (f, v_h),\ \ \forall v_h \in S_h, f \in L^2(\Omega).$$

此时, (1.51) 等价于 §1.2 中的 Galerkin 有限元法, 即半离散模型

$$\begin{cases} (u_{h,t}, v_h) + a(u_h, v_h) = (f, v_h), & \forall v_h \in S_h, \\ u_h(0) = u_h^0. \end{cases}$$

下面验证一下条件 (ia)、(ib) 和 (ii). 首先, 由 T_h 的定义和 (1.8), 有

$$(f, T_h f) = a(T_h f, T_h f) \geq \gamma \|T_h f\|_1^2 \geq 0,$$

并知: 若 $(f, T_h f) = 0$, 则 $T_h f = 0$. 其次, 若 $v_h \in S_h$ 使 $(v_h, T_h v_h) = 0$, 则 $T_h v_h = 0$. 从而

$$\|v_h\|^2 = (v_h, v_h) = a(T_h v_h, v_h) = 0,$$

即有 $v_h = 0$, 故 (ia) 得证. 为证 (ib), 令 $v_h = T_h f, w_h = T_h g$, 利用分部积分可得

$$\begin{aligned} (T_h f, g) - (f, T_h g) &= A(T_h g, T_h f) - A(T_h f, T_h g) \\ &= \int_\Omega \sum_{j=1}^d b_j \left(\frac{\partial w_h}{\partial x_j} v_h - \frac{\partial v_h}{\partial x_j} w_h\right) dx \\ &= -\int_\Omega \sum_{j=1}^d \left(2b_j \frac{\partial v_h}{\partial x_j} w_h + \frac{\partial b_j}{\partial x_j} v_h w_h\right) dx \\ &\leq C\|v_h\|_1 \|w_h\| \leq C(f, T_h f)^{\frac{1}{2}} \|T_h g\|, \end{aligned}$$

即 (ib) 得证. 至于条件 (ii), 它是椭圆方程边值问题 Galerkin 有限元法的标准结果, 已在 §1.3 中证明过 (引理 1.1).

例 1.2 拉氏乘子法. 此方法是 Babuška 在 [8] 中建议的, 这里的陈述与 [8] 稍有不同. 设 $\hat{S}_h$ 和 $\hat{S}'_h$ 分别是 $H^1(\Omega)$ 和 $H^1(\partial\Omega)$ 的子空间, 具有逼近性质:

$$\inf_{v_h\in\hat{S}_h}\{\|w-v_h\|+h\|w-v_h\|_1\}\le Ch^s\|w\|_s,\ \text{对于}1\le s\le r$$

$$\inf_{v'_h\in\hat{S}'_h}\{h^{-\frac{1}{2}}\|w'-v'_h\|_{H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega)}+h^{\frac{1}{2}}\|w'-v'_h\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)}\}$$
$$\le Ch^s\|w'\|_{H^s(\partial\Omega)},\ \text{对于}\frac{1}{2}\le s\le r-\frac{3}{2}$$

和逆性质

$$\|v_h\|_1\le Ch^{-1}\|v_h\|,\qquad \forall v_h\in\hat{S}_h$$

$$\|v'_h\|_{H^1(\partial\Omega)}\le Ch^{-1}\|v'_h\|_{L^2(\partial\Omega)},\qquad \forall v'_h\in\hat{S}'_h.$$

用 $<\cdot,\cdot>$ 代表 $L^2(\partial\Omega)$ 中的内积. 令 δ 为一充分小的正数. 定义如下子空间

$$S_h=\{v_h\in\hat{S}_h:<v_h,v'_h>=0,\ \forall v'_h\in\hat{S}'_h\}.$$

同时, 定义椭圆近似算子 $T_h:L^2(\Omega)\to S_h$

$$a(T_hf,v_h)=(f,v_h),\ \ \forall v_h\in S_h.$$

对于上述 $\{T_h,0<h<h_0\}$, 可按例 1 的方式验明假设条件 (ia)、(ib) 和 (ii) 成立. 事实上, (ia) 的验证与例 1.1 完全相同. 当验证 (ib) 时, 沿例 1.1 的过程, 由于 $S_h\not\subset H_0^1(\Omega)$, 在作分部积分时多出一项. 为此, 需要补充证明

$$\left|\int_{\partial\Omega}b_jn_jv_hw_hds\right|\le C\|v_h\|_1\cdot\|w_h\|,$$

其中 n_j 是 $\partial\Omega$ 的单位外法向量的第 j 个分量. 由迹定理, $\|v\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)}\le C\|v\|_1$. 其次, 根据 S_h 的定义以及 $\hat{S}_h$ 和 $\hat{S}'_h$ 的逼近性质, 适当地选取 $v'_j\in\hat{S}'_h$, 可得

$$\begin{aligned}\left|\int_{\partial\Omega}b_jn_jv_hw_hds\right| &= \left|\int_{\partial\Omega}(b_jn_jv_h-v'_j)w_hds\right|\\ &\le C\|b_jn_jv_h-v'_j\|_{H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega)}\|w_h\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)}\\ &\le Ch\|b_jn_jv_h\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)}\|w_h\|_{H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)}\\ &\le Ch\|b_jn_jv_h\|_1\cdot\|w_h\|_1\\ &\le C\|v_h\|_1\|w_h\|.\end{aligned}$$

由此 (ib) 得证. (ii) 的证明见 [7].

例 1.3 Nitsche 方法. 为解除边界上的限制，此方法利用一个修正的双线性泛函

$$\begin{aligned} a_h(v,w) &= a(v,w) - \left\langle \frac{\partial v}{\partial \nu}, w \right\rangle - \left\langle v, \frac{\partial w}{\partial \nu} + \sum_{j=1}^{d} b_j n_j w \right\rangle \\ &\quad + \beta h^{-1} < v, w > \end{aligned}$$

代替 $a(v,w)$, 其中 $\partial/\partial\nu = \sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d} a_{ij} n_i \partial/\partial x_j$, β 为某一取定的正常数. 引进范数

$$|||v||| = \|\nabla v\| + h^{\frac{1}{2}}\|\nabla v\|_{L^2(\partial\Omega)} + h^{-\frac{1}{2}}\|v\|_{L^2(\partial\Omega)}.$$

假定子空间 S_h 具有逼近性质

$$\inf_{v_h\in S_h}\{\|v-v_h\| + h|||v-v_h|||\} \le Ch^s\|v\|_s, \ 2\le s\le r,$$

和如下迹不等式 (参看 [11])

$$\begin{aligned} \|v_h\|_{L^2(\partial\Omega)} &\le Ch^{-\frac{1}{2}}\|v_h\|, \ \forall v_h\in S_h, \\ \|\nabla v_h\|_{L^2(\partial\Omega)} &\le Ch^{-\frac{1}{2}}\|v_h\|_1, \ \forall v_h\in S_h. \end{aligned}$$

可以证明，对适当选定的常数 β, $a_h(v,w)$ 满足:

$$\begin{aligned} |a_h(v,w)| &\le \tilde{M}\ |||v|||\cdot|||w|||, \\ a_h(v_h,v_h) &\ge \tilde{\gamma}\ |||v|||^2, \ \forall v\in S_h. \end{aligned}$$

其中 $\tilde{M}$ 和 $\tilde{\gamma}$ 为正常数.

借助 S_h 和双线性泛函 $a_h(\cdot,\cdot)$, 椭圆近似算子 $T_h: L^2(\Omega)\to S_h$ 由下式定义

$$a_h(T_h f, v_h) = (f, v_h), \ \forall v_h\in S_h.$$

用类似于引理 1.1 的证明可建立如下误差估计:

$$\|(T_h-T)f\| + h|||(T_h-T)f||| \le Ch^s\|f\|_{s-2}, \ \ 2\le s\le r,$$

即条件 (ii) 成立. 其次，由 T_h 的定义，有

$$(f, T_h f) = a_h(T_h f, T_h f) \ge \tilde{\gamma}|||T_h f|||^2 \ge 0,$$

其中等号仅当 $T_h f = 0$ 成立. 若 $v_h \in S_h$ 且 $(v_h, T_h v_h) = 0$, 则

$$\|v_h\|^2 = (v_h, v_h) = a_h(T_h v_h, v_h) = 0,$$

故 $v_h = 0$, 即 (ia) 成立. 为验证 (ib) 令 $v_h = T_h f, w_h = T_h g$, 则有

$$(T_h f, g) - (f, T_h g) = a_h(T_h g, T_h f) - a_h(T_h f, T_h g)$$

$$= a(w_h, v_h) - a(v_h, w_h)$$

$$= -\int_\Omega \sum_{j=1}^d 2b_j \frac{\partial v_h}{\partial x_j} w_h dx + \int_{\partial\Omega} \sum_{j=1}^d b_j n_j v_h w_h ds.$$

由 $|||\cdot|||$ 的定义和迹不等式, 对于上式右端第二项, 有

$$\left| \int_{\partial\Omega} \sum_{j=1}^d b_j n_j v_h w_h ds \right| \le C\|v_h\|_{L^2(\partial\Omega)} \|w_h\|_{L^2(\partial\Omega)}$$

$$\le C|||v_h||| \cdot \|w_h\| \le C(f, T_h f)^{\frac{1}{2}} \|T_h g\|.$$

很明显, 对于右端第一项也有这样的上方估计, 所以 (ib) 成立.

下面, 我们讨论半离散近似方法 (1.51) 的收敛性和误差估计. 先证如下引理

引理 1.3　*假定 (ia) 成立, 且*

$$T_h w_t + w = g, \quad t > 0, \tag{1.52}$$

则有

$$\|w(t)\| \le \|w(0)\| + C\left\{\|g(0)\| + \int_0^t \|g_t(\tau)\| d\tau\right\}. \tag{1.53}$$

证明　由方程 (1.52) 两端与 w_t 作内积乘, 得到

$$(T_h w_t, w_t) + \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|w\|^2 = (g, w_t) = \frac{d}{dt}(g, w) - (g_t, w).$$

因 $(T_h w_t, w_t) \ge 0$(由条件 (ia)), 故有

$$\frac{d}{dt}\|w\|^2 \le 2\left[\frac{d}{dt}(g, w) - (g_t, w)\right].$$

上式关于 t 积分后, 得

$$\begin{aligned}\|w(t)\|^2 &\le \|w(0)\|^2 + 2\|w(t)\| \cdot \|g(t)\| \\ &\quad + 2\|w(0)\|\|g(0)\| + 2\int_0^t \|g_t(s)\|\|w(s)\| ds \\ &\le \sup_{\tau \le t} \|w(\tau)\| \{\|w(0)\| + 4\sup_{s \le t} \|g(s)\| + 2\int_0^t \|g_t(s)\| ds\}.\end{aligned}$$

设 $\|w(\tau)\| = \sup\limits_{s\le t}\|w(s)\|$, $0\le\tau\le t$, 并对 $t=\tau$ 应用上述不等式，可得

$$\|w(t)\| \le \|w(0)\| + 4\sup_{s\le t}\|g(s)\| + 2\int_0^t \|g_t(s)\|ds.$$

注意到

$$\|g(t)\| = \|g(0) + \int_0^t g_t(s)ds\| \le \|g(0)\| + \int_0^t \|g_t(s)\|ds,$$

于是有

$$\|w(t)\| \le \|w(0)\| + C\{\|g(0)\| + \int_0^t \|g_t(s)\|ds\},$$

引理证毕.

现设 $u(t)$ 和 $u_h(t)$ 分别为连续问题 (1.50) 和半离散问题 (1.51) 的解. 令 $e(t) = u_h(t) - u(t)$, 则 $e(t)$ 满足如下方程

$$T_h e_t + e = \rho(t),\quad t>0, \tag{1.54}$$

其中 $\rho(t) = (T-T_h)(u_t - f) = -(T-T_h)Au$. 对 $w=e$ 应用引理 1.3 得

$$\|e(t)\| \le \|e(0)\| + C\left\{\|\rho(0)\| + \int_0^t \|\rho_t(s)\|ds\right\}. \tag{1.55}$$

由假定条件 (ii), 有

$$\|\rho(0)\| = \|(T-T_h)Au^0\| \le Ch^r\|Au^0\|_{r-2} \le Ch^r\|u^0\|_r,$$

$$\|\rho_t(s)\| = \|(T-T_h)Au_t(s)\| \le Ch^r\|Au_t(s)\|_{r-2} \le Ch^r\|u_t(s)\|_r.$$

将上述估计式代入 (1.55), 最后得到

$$\|e(t)\| \le \|e(0)\| + Ch^r\left\{\|u^0\|_r + \int_0^t \|u_t(s)\|_r ds\right\}.$$

于是，我们证得如下定理.

定理 1.7 *设算子 T_h 满足条件 (ia) 和 (ii), 且初值 u_h^0 满足*

$$\|u_h^0 - u^0\| \le Ch^r\|u^0\|_r,$$

则半离散问题 (1.51) 的解 $u_h(t)$ 满足

$$\|u_h(t) - u(t)\| \le Ch^r\left\{\|u^0\|_r + \int_0^t \|u_t(s)\|_r ds\right\}. \tag{1.56}$$

关于齐次问题 ($f=0$ 的情形) 如果条件 (ia)、(ib) 和 (ii) 成立，可以证明类似于前节定理 1.4 和定理 1.5 的误差估计式.

注记:

1. 关于系数依赖于时间、非自共轭二阶线性抛物方程 Galerkin 有限元法的理论研究参看 [7] 或 [2] 中第 4 章.
2. 关于有限元近似解的 C- 模误差估计以及齐次方程非光滑初值问题的误差估计参看 [2] 中第 5、3 章.
3. 抛物问题的混合有限元法和时、空变量同时离散化的有限元法参看 [2] 中第 9、13 章.

第二章　抛物方程的全离散计算格式

抛物型偏微分方程的初边值问题，经过前章介绍的有限元法近似转化为常微分方程组的初值问题，其中时间变数仍为连续变量，称为半离散问题. 为了获得所期待的数值解，尚需将前章所得半离散问题对时间变量进一步离散化，即建立全离散计算格式. 半离散问题的完全离散化可以通过差分逼近、指数函数的有理逼近等方法来完成. 在本章中，将以热传导问题为例，介绍全离散计算格式的构造与相关的理论分析方法.

§2.1　简单全离散格式

考虑热传导问题：

$$\begin{cases} u_t - \Delta u = f(x,t),\ x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d, 0 < t \le T, \\ u = 0,\ (x,t) \in \partial\Omega \times (0,T], \\ u(x,0) = u^0(x),\ x \in \Omega, \end{cases} \tag{2.1}$$

其中 $\Delta = \sum_{j=1}^{d} \partial^2/\partial x_j^2$ 为 Laplace 算符. 在取定有限元近似空间 $S_h \subset H_0^1(\Omega)$ 之后，(2.1) 的 Galerkin 有限元 (半离散) 近似为：求映射 $u_h(t) : \overline{I} = [0,T] \to S_h$，使得

$$\begin{cases} (\dfrac{\partial u_h}{\partial t}, v_h) + (\nabla u_h, \nabla v_h) = (f, v_h),\ \forall v_h \in S_h, \\ u_h(0) = u_h^0 \in S_h. \end{cases} \tag{2.2}$$

本节采用差分逼近方法构造问题 (2.1) 的两个常用的全离散格式. 为此，用节点 $0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_N = T$ 代替时间区间 $\overline{I} = [0,T]$，记 $I_n = (t_{n-1}, t_n)$，称 $k_n = t_n - t_{n-1}$ 为时间步长，目的是求初边值问题真解 $u(x,t)$ 在节点 $t_n, n = 1,2,\cdots$ 处的近似值，记作 U^n.

向后 Euler-Galerkin 格式

求 $U^n \in S_h,\ n = 0,1,\cdots$ 使得

$$\begin{cases} \left(\dfrac{U^n - U^{n-1}}{k_n}, v_h\right) + (\nabla U^n, \nabla v_h) = (f(t_n), v_h), \\ \qquad \forall v_h \in S_h, n = 1,2,\cdots, \\ U^0 = u_h^0. \end{cases} \tag{2.3}$$

此格式是由向后差商 $(u_h(t_n)-u_h(t_{n-1}))/k_n$ 近似方程 (2.2) 中的导数 $\partial u_h(t_n)/\partial t$，再将 $u_h(t_l)$ 改记为 U^l 而导出的．不难看出，(2.3) 相对于方程 (2.2) 的局部截断误差为 $O(k_n)$．

采用第一章 §1.2 中的矩阵记号，格式 (2.3) 可改写成

$$(M+k_nB)\alpha^n=M\alpha^{n-1}+k_nF(t_n),\ n=1,2,\cdots. \tag{2.4}$$

由此看到，当 U^{n-1} (即 α^{n-1}) 已知，那么通过求解具正定、对称系数矩阵 $(M+k_nB)$ 的线性代数方程组 (2.4)，便可求出下一时刻的近似解 U^n，这是一个隐型格式．

下面假定子空间 S_h 具有第一章 §1.2 所述逼近性质 (1.10)．我们用能量估计法来讨论全离散格式 (2.3) 的收敛性和误差估计．

定理 2.1 设 u 为热传导问题 (2.1) 的精确解，而 $\{U^n\}$ 是由 (2.3) 所定义的近似解，则有 (记 $k=\max\limits_n k_n$)

$$\begin{aligned}&\|U^n-u(t_n)\|\le\|u_h^0-u^0\|+Ch^r\left\{\|u^0\|_r+\right.\\&\left.\int_0^{t_n}\|u_t(s)\|_r\mathrm{d}s\right\}+Ck\int_0^{t_n}\|u_{tt}(s)\|\mathrm{d}s,\ n\ge0.\end{aligned} \tag{2.5}$$

证明 令 $U^n-u(t_n)=U^n-P_1u(t_n)+P_1u(t_n)-u(t_n)=\theta^n+\eta^n$，其中 $P_1:H_0^1(\Omega)\to S_N$ 为 "椭圆投影" 算子：$(\nabla P_1u,\nabla v_h)=(\nabla u,\nabla v_h)$，$\forall v_h\in S_h$．由第一章引理 1.1，有

$$\begin{aligned}\|\eta^n\|&=\|P_1u(t_n)-u(t_n)\|\le Ch^r\|u(t_n)\|_r\\&\le Ch^r\left\{\|u^0\|_r+\int_0^{t_n}\|u_t(s)\|_r\mathrm{d}s\right\}.\end{aligned} \tag{2.6}$$

其次，不难验证 θ^n 满足如下方程 (记 $\bar\partial_t\theta^n=(\theta^n-\theta^{n-1})/k_n$)

$$(\bar\partial_t\theta^n,v_h)+(\nabla\theta^n,\nabla v_h)=-(R^n,v_h),\ \forall v_h\in S_h, \tag{2.7}$$

其中

$$\begin{aligned}R^n&=P_1\bar\partial_tu(t_n)-u_t(t_n)\\&=(P_1-I)\bar\partial_tu(t_n)+(\bar\partial_tu(t_n)-u_t(t_n))=R_1^n+R_2^n.\end{aligned}$$

在 (2.7) 式中取 $v_h=\theta^n$，注意到 $(\nabla\theta^n,\nabla\theta^n)\ge0$，可得

$$(\bar\partial_t\theta^n,\theta^{n-1})\le|(R^n,\theta^n)|\le\|R^n\|\,\|\theta^n\|$$

或者 $\|\theta^n\|^2-(\theta^{n-1},\theta^n)\le k_n\|R^n\|\,\|\theta^n\|$，从而

$$\|\theta^n\|^2\le\left(\|\theta^{n-1}\|+k_n\|R^n\|\right)\cdot\|\theta^n\|.$$

消去上式两端共同因子并逐步递推，可得

$$\|\theta^n\| \le \|\theta^0\| + \sum_{j=1}^{n} k_j\left(\|R_1^j\| + \|R_2^j\|\right). \tag{2.8}$$

因为

$$R_1^j = (P_1 - I)k_j^{-1}\int_{t_{j-1}}^{t_j} u_t(s)\mathrm{d}s = k_j^{-1}\int_{t_{j-1}}^{t_j}(P_1 - I)u_t(s)\mathrm{d}s,$$

故有

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{n} k_j\|R_1^n\| &\le \sum_{j=1}^{n}\int_{t_{j-1}}^{t_j} Ch^r\|u_t(s)\|_r\mathrm{d}s\\ &\le Ch^r\int_0^{t_n}\|u_t(s)\|_r\mathrm{d}s.\end{aligned}$$

其次，由于

$$R_2^j = k_j^{-1}(u(t_j) - u(t_{j-1})) - u_t(t_j) = -k_j^{-1}\int_{t_{j-1}}^{t_j}(s - t_{j-1})u_{tt}(s)\mathrm{d}s,$$

因此，

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{n} k_j\|R_2^j\| &\le \sum_{j=1}^{n}\left\|\int_{t_{j-1}}^{t_j}(s - t_{j-1})u_{tt}(s)\mathrm{d}s\right\|\\ &\le Ck\int_0^{t_n}\|u_{tt}(s)\|\mathrm{d}s.\end{aligned}$$

此外，有

$$\|\theta^0\| = \|u_h^0 - P_1u^0\| \le \|u_h^0 - u^0\| + Ch^r\|u^0\|_r. \tag{2.9}$$

将上述估计代入 (2.8) 并对 $U^n - u(t_n) = \theta^n + \eta^n$ 应用三角不等式，定理便可得证.

Crank-Nicolson-Galerkin 格式

求 $U^n \in S_h$，$n = 0, 1, \cdots$，使得

$$\begin{cases}\left(\dfrac{U^n - U^{n-1}}{k_n}, v_h\right) + \left(\nabla\dfrac{U^n + U^{n-1}}{2}, \nabla v_h\right) = (f(t_{n-\frac{1}{2}}, v_h)),\\ \forall v_h \in S_h, n = 1, 2, \cdots,\\ U^0 = u_h^0.\end{cases} \tag{2.10}$$

此格式是由在 $t_{n-\frac{1}{2}} = t_n - \frac{1}{2}k_n$ 点用中心差商 $(u_h(t_n) - u_h(t_{n-1}))/k_n$ 近似 (2.2) 中导数 $\partial u_h(t_{n-\frac{1}{2}})/\partial t$ 并用平均值 $(u_h(t_n) + u_h(t_{n-1}))/2$ 近似 $u_h(t_{n-\frac{1}{2}})$ 导出的，它的局部截断误差为 $O(k_n^2)$.

采用矩阵记号，此格式可改写为

$$\left(M+\frac{k_n}{2}B\right)\alpha^n=\left(M-\frac{k_n}{2}B\right)\alpha^{n-1}+k_nF(t_{n-\frac{1}{2}}),$$
$$n=1,2,\cdots,$$

这也是一个隐格式.

定理 2.2 仍设 u 为热传导问题 (2.1) 的精确解和 $k=\max\limits_n k_n$，则由 Crank-Nicolson-Galerkin 格式 (2.10) 所定义的近似解 U^n 满足

$$\begin{aligned}\|U^n-u(t_n)\|\le\ &\|u_h^0-u^0\|+Ch^r\left\{\|u^0\|_r+\int_0^{t_n}\|u_t(s)\|_r\mathrm{d}s\right\}\\&+Ck^2\int_0^{t_n}\left(\|u_{ttt}(s)\|+\|\Delta u_{tt}(s)\|\right)\mathrm{d}s.\end{aligned}\tag{2.11}$$

证明 类似前面作法，令 $U^n-u(t_n)=\left(U^n-P_1u(t_n)\right)+\left(P_1u(t_n)-u(t_n)\right)=\theta^n+\eta^n$. 已知

$$\|\eta^n\|\le Ch^r\|u(t_n)\|_r\le Ch^r\left\{\|u^0\|_r+\int_0^{t_n}\|u_t(s)\|_r\mathrm{d}s\right\}.$$

其次，容易验证 $\theta^n\in S_h$ 满足如下方程

$$(\overline{\partial}_t\theta^n,v_h)+\left(\nabla\frac{\theta^n+\theta^{n-1}}{2},\nabla v_h\right)=-(R^n,v_h),\ \forall v_h\in S_h,\tag{2.12}$$

其中

$$\begin{aligned}R^n=\ &(P_1-I)\overline{\partial}_tu(t_n)+\left(\overline{\partial}_tu(t_n)-u_t(t_{n-\frac{1}{2}})\right)+\\&\Delta u(t_{n-\frac{1}{2}})-\frac{1}{2}\Delta\left(u(t_n)+u(t_{n-1})\right)=R_1^n+R_2^n+R_3^n.\end{aligned}$$

在 (2.12) 中取 $v_h=\frac{1}{2}(\theta^n+\theta^{n-1})$，得到

$$\left(\overline{\partial}_t\theta^n,\frac{1}{2}(\theta^n+\theta^{n-1})\right)\le\|R^n\|\left(\|\theta^n\|+\|\theta^{n-1}\|\right)/2$$

或者 $\|\theta^n\|^2-\|\theta^{n-1}\|^2\le k_n\|R^n\|\left(\|\theta^n\|+\|\theta^{n-1}\|\right)$，消去两端共同因子和关于 n 递推，可得

$$\|\theta^n\|\le\|\theta^0\|+\sum_{j=1}^n k_j\left(\|R_1^j\|+\|R_2^j\|+\|R_3^j\|\right).\tag{2.13}$$

由于

$$\begin{aligned}\|R_1^j\| &= \|(P_1 - I)\bar{\partial}_t u(t_j)\| \le Ch^r\|\bar{\partial}_t u(t_j)\|_r \\ &\le Ch^r\|k_j^{-1}\int_{t_{j-1}}^{t_j} u_t(s)\mathrm{d}s\|_r \\ &\le Ch^r k_j^{-1}\int_{t_{j-1}}^{t_j} \|u_t(s)\|_r \mathrm{d}s\end{aligned}$$

和

$$\begin{aligned}\|R_2^j\| &= \|\bar{\partial}_t u(t_j) - u_t(t_{j-\frac{1}{2}})\| \\ &= \frac{1}{2}k_j^{-1}\left\|\int_{t_{j-1}}^{t_{j-\frac{1}{2}}}(s-t_{j-1})^2 u_{ttt}(s)\mathrm{d}s + \int_{t_{j-\frac{1}{2}}}^{t_j}(s-t_j)^2 u_{ttt}(s)\mathrm{d}s\right\| \\ &\le Ck_j\int_{t_{j-1}}^{t_j}\|u_{ttt}(s)\|\mathrm{d}s,\end{aligned}$$

类似地，有

$$\begin{aligned}\|R_3^j\| &= \left\|\triangle\left[u(t_{j-\frac{1}{2}}) - \frac{1}{2}(u(t_j) + u(t_{j-1}))\right]\right\| \\ &\le Ck_j\int_{t_{j-1}}^{t_j}\|\triangle u_{tt}(s)\|\mathrm{d}s.\end{aligned}$$

合并以上估计，得到

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{n} k_j(\|R_1^j\| + \|R_2^j\| + \|R_3^j\|) \le Ch^r\int_0^{t_n}\|u_t(s)\|_r\mathrm{d}s + \\ Ck^2\int_0^{t_n}(\|u_{tt}(s)\| + \|\triangle u_{ttt}(s)\|)\mathrm{d}s.\end{aligned}$$

此外，$\|\theta^0\| \le \|u_h^0 - u^0\| + Ch^r\|u^0\|_r$. 将上述估计代入 (2.13)，可得 $\|\theta^n\|$ 的估计，再与 $\|\eta^n\|$ 的估计结合，即证定理中的误差估计式.

最后，补充说明一下，为了保证定理 2.1 和定理 2.2 中的误差估计有效，要求热传导问题 (2.1) 的真解 $u(x,t)$ 具有一定的光滑性质，使得估计式右端为有界量. 另外，从定理给出的估计式清楚的看出，近似解 U^n 与真解 $u(t_n)$ 之间的误差可分为两部分，一部分是初始值近似的误差 $\|u_h^0 - u^0\|$，另一部分是由于空间和时间变量离散化所产生的.

§2.2 高阶精度单步格式

本节介绍通过指数函数的有理逼近来建立半离散问题的高阶精度单步格式的方法.

先考虑齐次热传导问题：

$$\begin{cases} u_t - \Delta u = 0, \ (x,t) \in \Omega \times (0,\infty), \\ u = 0, \ (x,t) \in \partial\Omega \times (0,\infty), \\ u = u^0(x), \ x \in \Omega, t = 0. \end{cases} \tag{2.14}$$

设 $\{S_h, \ h > 0\}$ 为有限维空间族，并给定了逼近 $T = (-\Delta)^{-1}$ 的一族算子 $\{T_h, \ h > 0\}$，其中算子 $T_h : L^2(\Omega) \to S_h$ 具有以下性质：

(i) T_h 是自共轭的，它在 $L^2(\Omega)$ 上正半定并在 S_h 为正定；

(ii) 对任意 $f \in H^s(\Omega)$, $0 \le s \le r-2$,

$$\|(T_h - T)f\| \le Ch^{s+2}\|f\|_s, \tag{2.15}$$

T_h 代表一般的椭圆逼近算子 (见第一章 §1.4). 然后，令 $\Delta_h = -T_h^{-1}$, 并视 Δ_h 为从 S_h 到 S_h 的算子 (离散 Laplace 算子). 由此，可以定义问题 (2.14) 的半离散近似：求 $u_h(t) \in S_h, t \ge 0$ 满足

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_h}{\partial t} - \Delta_h u_h = 0, \\ u_h(0) = u_h^0 \in S_h. \end{cases} \tag{2.16}$$

此问题的解可表示为 $u_h(t) = e^{t\Delta_h}u_h^0$, 而 $e^{t\Delta_h}$ 称为半离散问题 (2.16) 的解算子.

现设 $r(z)$ 是指数函数 e^z 的一个有理分式近似：

$$r(z) = e^z + O(|z|^{\nu+1}), \ 当|z| \to 0, \tag{2.17}$$

其中 ν 为某一非负整数，并且 $r(z)$ 在负实轴上无极点. 利用函数 $r(z)$, 我们可以定义问题 (2.16) 的如下单步全离散格式：

$$\begin{cases} U^{n+1} = r(k\Delta_h)U^n, \ n = 0, 1, \cdots, \\ U^0 = u_h^0, \end{cases} \tag{2.18}$$

其中 U^n, u_h^0 均属于 $S_h, k > 0$ 为时间步长，并称 (2.18) 为 (2.16) 的 ν 阶精度格式.

作为例子，考虑 $S_h \subset H_0^1(\Omega)$ 和 T_h 为 Galerkin 逼近算子. 此时，T_h 和 Δ_h 分别满足：

$$(\nabla T_h f, \nabla v_h) = (f, v_h), \ \forall v_h \in S_h, f \in L^2(\Omega), \tag{2.19}$$

$$(-\Delta_h u_h, v_h) = (\nabla u_h, \nabla v_h), \ \forall u_h, v_h \in S_h. \tag{2.20}$$

已知 $e^z = (1-z)^{-1} + O(|z|^2)$, 当 $|z| \to 0$. 若取

$$r_{0,1}(z) = (1-z)^{-1},$$

则由 (2.18) 所定义的全离散格式为向后 Euler-Galerkin 格式：

$$\big(U^n, v_h\big) + k\big(\nabla U^n, \nabla v_h\big) = (U^{n-1}, v_h),\ \forall v_h \in S_h. \tag{2.21}$$

其次，若取

$$r_{1,1}(z) = \big(1 + \frac{z}{2}\big)\big(1 - \frac{z}{2}\big)^{-1},$$

此时由 (2.18) 所得全离散格式为 Crank-Nicolson-Galerkin 格式：

$$\begin{aligned}&(U^n, v_h) + \frac{k}{2}(\nabla U^n, \nabla v_h)\\ &= (U^{n-1}, v_h) - \frac{k}{2}(\nabla U^{n-1}, \nabla v_h),\ \forall v_h \in S_h.\end{aligned} \tag{2.22}$$

由于 $e^z = r_{1,1}(z) + O(|z|^3)$, 当 $|z| \to 0$, 所以格式 (2.22) 比 (2.21) 的逼近精度高一阶.

设 $\left\{\lambda_j^{(h)}\right\}_{j=1}^{N_h}$ 为算子 $-\Delta_h$ 的特征值, $\left\{\phi_j^{(h)}\right\}_{j=1}^{N_h} \subset S_h$ 为相应的正规、直交特征函数：$\left(\phi_i^{(h)}, \phi_j^{(h)}\right) = \delta_{ij}$, $i, j = 1, 2, \cdots, N_h$. 对任意 $v_h \in S_h$, 有展式：$v_h = \sum\limits_{j=1}^{N_h} (v_h, \phi_j^{(h)})\phi_j^{(h)}$, 并且 $\|v_h\|^2 = \sum\limits_{j=1}^{N_h} |(v_h, \phi_j^{(h)})|^2$ (Parseval 等式). 由此，可得全离散格式 (2.18) 的下述谱表达式：

$$\begin{aligned}U^n &= r^n(k\Delta_h)u_h^0\\ &= \sum_{j=1}^{N_h} r^n(-k\lambda_j^{(h)})(u_h^0, \phi_j^{(h)})\phi_j^{(h)}.\end{aligned} \tag{2.23}$$

由表达式 (2.23) 可以看出：若

$$\max_{1\le j\le N_h} \left|r(-k\lambda_j^{(h)})\right| \le 1, \tag{2.24}$$

则有

$$\|U^n\|^2 \le \sum_{j=1}^{N_h} \left|(u_h^0, \phi_j^{(h)})\right|^2 = \|u_h^0\|^2.$$

从而格式 (2.18) 在 $L^2(\Omega)$ 范数意义下是稳定的. 为了对条件 (2.24) 作进一步的分析，需要对算子 Δ_h 的特征值 $\left\{-\lambda_j^{(h)}\right\}_{j=1}^{N_h}$ $(\lambda_j^{(h)} > 0)$ 加以估计. 假定在 S_h 中如下逆不等式成立：

$$\begin{aligned}&\|\nabla v_h\| \le C_0 h^{-1}\|v_h\|,\ \forall v_h \in S_h,\\ &(C_0 : \text{与}h\text{和}v_h\text{无关的常数})\end{aligned} \tag{2.25}$$

则有

$$\lambda_j^{(h)}\|\phi_j^{(h)}\|^2 = \lambda_j^{(h)}(\phi_j^{(h)},\phi_j^{(h)}) = -(\Delta_h\phi_j^{(h)},\phi_j^{(h)})$$
$$= \|\nabla\phi_j^{(h)}\|^2 \le C_0^2h^{-2}\|\phi_j^{(h)}\|^2,$$
$$j=1,2,\cdots,N_h.$$

由此可得如下估计式：

$$0<\lambda_m^{(h)} = \max_{1\le j\le N_h}\lambda_j^{(h)} \le C_0^2h^{-2}, \tag{2.26}$$

从而条件 (2.24) 的检验转化为考察如下形式的不等式何时成立

$$\max_{0<\lambda\le\lambda_m^{(h)}}\left|r(-k\lambda)\right| = \max_{0<\wedge\le k\lambda_m^{(h)}}\left|r(-\wedge)\right| \le 1, \tag{2.27}$$

其中 $k\lambda_m^{(h)} \le C_0^2(kh^{-2})$.

考虑一个简单例子，已知 $e^z=(1+z)+O(|z|^2)$, 当 $|z|\to 0$, 若取 $r(z)=1+z$, 此时 (2.18) 为熟知的向前 Euler 格式

$$U^{n+1}=(1+k\Delta_h)U^n,\ n=0,1,\cdots. \tag{2.28}$$

因为 $|r(-\wedge)|=|1-\wedge|\le 1$, 当 $0<\wedge\le 2$. 据此和 (2.27) 可知：只要限制

$$k/h^2\le\alpha_0=\frac{2}{C_0^2}(\text{常数}), \tag{2.29}$$

那么条件 (2.24) 必定成立，(2.29) 称为网比限制条件. 可见，对于向前 Euler 格式而言，为保证格式稳定需要对网比附加限制条件 (2.29), 即属条件稳定格式.

单步全离散格式 (2.18) 可按如下方式加以分类：如果其中有理分式 $r(z)$ 分别满足条件：

(Ⅰ) $|r(-\wedge)|<1$, 当 $0<\wedge<\alpha$, α 为某个正实数;

(Ⅱ) $|r(-\wedge)|<1$, 对所有 $\wedge>0$;

(Ⅲ) $|r(-\wedge)|<1$, 当 $\wedge>0$, 且 $|r(-\infty)|<1$,

则我们说格式分别属于Ⅰ、Ⅱ和Ⅲ类. 不难看出，条件 (Ⅰ)、(Ⅱ) 和 (Ⅲ) 是逐次增强的，即每一条件都蕴含着它前面的条件. 另外，若 $r(z)$ 属于Ⅰ类并且

$$k\lambda_m^{(h)}\le\alpha_1,\text{对某个}\alpha_1\in(0,\alpha),$$

则称格式 (2.18) 属于 Ⅰ′ 类；若 $r(z)$ 属于Ⅱ类并且

$$k\lambda_m^{(h)}\le\alpha_2,\text{对某个}\alpha_2\in(0,\infty),$$

则称格式属于 Ⅱ′ 类.

下面来讨论全离散格式 (2.18) 与半离散问题 (2.2) 之间解的误差估计.

定理 2.3 假定格式 (2.18) 属于 Ⅰ′、Ⅱ′ 或Ⅲ类，则对于 $t_n = nk > 0$ 和 $u_h^0 = P_0 u^0$，有

$$\|U^n - u_h(t_n)\| \le Ck^\nu t_n^{-\nu} \|u^0\|. \tag{2.30}$$

为证此定理，引进函数

$$F_h(z) = r(z)^n - e^{nz},$$

于是 $U^n - u_h(t_n) = F_h(k\triangle_h)u_h^0$. 注意到

$$\|F_h(k\triangle_h)\| = \sup_{1\le j\le N_h} |F_h(-k\lambda_j^{(h)})| = \sup_{\wedge/k\in\sigma_h} |F_h(-\wedge)|,$$

其中 σ_h 为算子 $-\triangle_h$ 的谱集. 由此可知，上述定理是如下引理的推论.

引理 2.1 设格式属于 Ⅰ′、Ⅱ′ 或Ⅲ，则对于 $t_n = nk > 0$,

$$|F_h(-\wedge)| \le Ck^\nu t_n^{-\nu}, \text{ 当 } \wedge/k \in \sigma_h. \tag{2.31}$$

证明 要证的估计式等价于

$$|F_h(-\wedge)| \le C(k/t_n)^\nu = Cn^{-\nu}, \tag{2.32}$$

其中

$$\begin{aligned} F_h(-\wedge) &= r(-\wedge)^n - e^{-n\wedge} \\ &= [r(-\wedge) - e^{-\wedge}] \sum_{j=0}^{n-1} r(-\wedge)^{n-1-j} e^{-j\wedge}. \end{aligned}$$

当格式 (2.18) 属于 Ⅰ′ 和 Ⅱ′ 类时，令 α^* 分别地取 α_1 和 α_2, 则有

$$|r(-\wedge)| < 1, \text{对任意} \wedge \in (0, \alpha^*).$$

另外，由假设 (2.17), 有

$$\begin{aligned} r(-\wedge) &= e^{-\wedge} + O(|\wedge|^{\nu+1}) \\ &= \exp\big(-\wedge + o(\wedge)\big), \text{ 当} \wedge \to 0. \end{aligned}$$

从而，存在常数 $\beta \in (0,1)$ 使得

$$|r(-\wedge)| \le e^{-\beta\wedge}, \text{ 当} 0 < \wedge < \alpha^*,$$

并有

$$|r(-\wedge) - e^{-\wedge}| \le C\wedge^{\nu+1}, \text{ 对} 0 < \wedge < \alpha^*.$$

已知当 $\wedge/k \in \sigma_h$ 时，$0 < \wedge < \alpha^*$, 故有

$$
\begin{aligned}
|F_h(-\wedge)| &\le Cn\,\wedge^{\nu+1}\,e^{-\beta(n-1)\wedge} \\
&= Cn^{-\nu}(n\wedge)^{\nu+1}e^{-\beta(n\wedge)}e^{\beta\wedge} \\
&\le \widetilde{C}n^{-\nu}, \text{ 当} 0 < \wedge < \alpha^*
\end{aligned}
$$

(其中用到 $(n\wedge)^{\nu+1}e^{-\beta(n\wedge)} \to 0$(当 $n \to +\infty$) 的事实), 从而引理 2.1 对 Ⅰ′ 和 Ⅱ′ 类格式成立.

对于Ⅲ类格式, 需补充证明估计式 (2.32) 在 $\wedge$ 大于某一固定值情形仍然成立. 为此，不妨考虑 $\wedge \ge 1$ 的情形，此时

$$e^{-n\wedge} \le e^{-n} \le Cn^{-\nu} \ (\text{因} n^{\nu}e^{-n} \to 0, \text{当} n \to +\infty).$$

其次，因 $|r(-\infty)| < 1$, 故有

$$\sup_{\wedge\ge 1}|r(-\wedge)| \le e^{-C_1},\ C_1 > 0(\text{常数}).$$

于是，$\sup\limits_{\wedge\ge 1}|r(-\wedge)^n| \le e^{-C_1 n} \le Cn^{-\nu}$. 因此，对于 $\wedge \ge 1$ 的情形亦有

$$|F_h(-\wedge)| = |r(-\wedge)^n - e^{-n\wedge}| \le Cn^{-\nu}.$$

至此，引理 2.1 得证.

将定理 2.3 的估计与第一章中半离散近似解的误差估计 (见第一章定理 1.5), 可得全离散格式近似解与齐次热传导问题真解的误差估计.

定理 2.4 *假定格式 (2.18) 属于 Ⅰ′、Ⅱ′ 或Ⅲ类，则对于 $t_n = nk > 0$ 和 $u_h^0 = P_0u_0$ 有*

$$\|U^n - u(t_n)\| \le C\{h^r t_n^{-\frac{r}{2}} + k^{\nu}t_n^{-\nu}\}\|u^0\|. \tag{2.33}$$

附注 Padé 逼近方法可用来构造形如 (2.18) 的高阶精度全离散格式. 由 Padé 逼近知

$$r_{p,q}(z) = e^z + O(z^{p+q+1}),\ \text{当}|z| \to 0,$$

其中 $r_{p,q}(z) = Q_{p,q}(z)/P_{p,q}(z)$,

$$Q_{p,q}(z) = \sum_{j=0}^{q}\frac{(p+q-j)!q!}{(p+q)!j!(q-j)!}z^j,$$

$$P_{p,q}(z) = \sum_{j=0}^{p}\frac{(p+q-j)!p!}{(p+q)!j!(p-j)!}z^j.$$

若取 $r(z)=r_{p,q}(z)$, 可以验证:

1. 当 $p<q$ 时，格式 (2.18) 属于 I 类;
2. 当 $p=q$ 时，格式 (2.18) 属于 II 类;
3. 当 $p>q$ 时，格式 (2.18) 属于III类，并有 $r(-\infty)=0$.

作为属于III类而 $r(-\infty)\neq 0$ 的一个例子，有如下 Calahan 格式，其时

$$r(z)=1+\frac{z}{1-bz}-\frac{\sqrt{3}}{6}\left(\frac{z}{1-bz}\right)^2,$$

$$b=\frac{1}{2}\left(1+\frac{\sqrt{3}}{3}\right).$$

当 $\wedge\in(0,+\infty)$, 函数 $r(-\wedge)$ 是 $\wedge$ 的单调下降函数，并有 $r(-\infty)=1-\sqrt{3}>-1$, 所以 $|r(-\infty)|<1$ 且有 $|r(-\wedge)|<1$, 当 $\wedge>0$. 可见，上述格式属于III类. 其次，因 $r(z)=e^z+O(|z|^4)$ 当 $|z|\to 0$, 故此格式为 3 阶精度格式 ($\nu=3$).

下面再来扼要地介绍一下非齐次热传导问题高阶精度单步格式的构造方法. 此时问题 (2.14) 中的第一式是含源项的热传导方程

$$u_t-\Delta u=f(x,t),\ (x,t)\in\Omega\times(0,\infty).$$

这里，假定空间变量的离散化与记号如同前面齐次问题的讨论中所述，则可将非齐次热传导问题的半离散近似写成：求 $u_h(t)\in S_h, t\geq 0$ 满足

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u_h}{\partial t}-\Delta_h u_h=P_0 f(t),\ t>0,\\[2mm] u_h(0)=u_h^0.\end{cases}\tag{2.34}$$

设 $k>0$ 为时间步长. 其次，设 $r(z),q_1(z),\cdots,q_m(z)$ 为给定的有理函数，它们在算子 $k\Delta_h$ 的谱集上一致有界 (关于 k 和 h), $\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_m$ 为 $[0,1]$ 上的互异实数. 这样，可定义近似 (2.34) 的一个如下形式的全离散格式:

$$\begin{aligned}&U^{n+1}=r(k\Delta_h)U^n+k\sum_{i=1}^{m}q_i(k\Delta_h)P_0 f(t_n+\beta_i k),\\ &\qquad n=0,1,\cdots\\ &U^0=u_h^0.\end{aligned}\tag{2.35}$$

由此确定的 $\{U^n\}$ 将被当作连续问题真解 $u(x,t)$ 在 $t_n=nk,n=0,1,\cdots$ 时刻的近似.

格式 (2.35) 对于 (2.34) 的逼近精度 (又称截断误差) 可以这样来描述：若对于任意充分光滑的 $f(t)$, 均有

$$\begin{aligned}\rho_n &= u_h(t_{n+1}) - r(k\Delta_h)u_h(t_n) \\ &\quad -k\sum_{i=1}^{m} q_i(k\Delta_h)P_0 f(t_n+\beta_i k) \\ &= O(k^{p+1}),\ \text{当} k\to 0,\end{aligned} \tag{2.36}$$

也就是说，将 (2.34) 的解 $u_h(t)$ 代入方程 (2.35) 后，此方程两端之差为 $O(k^{p+1})$，此时称 (2.35) 为 p 阶精度格式. 将 (2.36) 右端中的 $P_0 f$ 换成 $u_{h,t}-\Delta_h u_h$，并对 t 作 Taylor 展开可得 (记 $\mathrm{d}^l u_h/\mathrm{d}t^l$ 为 $u_h^{(l)}$)

$$\begin{aligned}\rho_n = &\sum_{l=0}^{p}\frac{k^l}{l!}u_h^{(l)}(t_n) - r(k\Delta_h)u_h(t_n) \\ &-k\sum_{i=1}^{m} q_i(k\Delta_h)\sum_{l=0}^{p-1}\frac{(\beta_i k)^l}{l!}(u_h^{(l+1)}-\Delta_h u_h^{(l)})(t_n) \\ &+\int_{t_n}^{t_{n+1}}\frac{(t_{n+1}-s)^p}{p!}u_h^{(p+1)}(s)\mathrm{d}s \\ &-k\sum_{i=1}^{m} q_i(k\Delta_h)\int_{t_n}^{t_n+\beta_i k}\frac{(t_n+\beta_i k-s)^{p-1}}{(p-1)!}u_h^{(p+1)}(s)\mathrm{d}s \\ &+k\sum_{i=1}^{m} q_i(k\Delta_h)\int_{t_n}^{t_n+\beta_i k}\frac{(t_n+\beta_i k-s)^{p-1}}{(p-1)!}\Delta_h u_h^{(p)}(s)\mathrm{d}s.\end{aligned} \tag{2.37}$$

若令

$$\begin{aligned}&h_0(z) = 1 - r(z) + z\sum_{i=1}^{m} q_i(z), \\ &h_l(z) = 1 - l\sum_{i=1}^{m}\beta_i^{l-1}q_i(z) + z\sum_{i=1}^{m}\beta_i^l q_i(z), \\ &\qquad 1\le l\le p-1, \\ &h_p(z) = 1 - p\sum_{i=1}^{m}\beta_i^{p-1}q_i(z),\end{aligned}$$

则有

$$\rho_n = \sum_{l=0}^{p}\frac{k^l}{l!}h_l(k\Delta_h)u_h^{(l)}(t_n) + R_{n,1} + R_{n,2} + R_{n,3},$$

其中 $R_{n,i}(i=1,2,3)$ 分别代表 (2.37) 右端含有积分的那三项. 注意到 $R_{n,i} = O(k^{p+1}), i=1,2,3$, 由表示式 (2.37) 可知：全离散格式 (2.35) 为 p 阶精度的充分与必要条件为

$$h_l(z) = O(|z|^{p+1-l}),\ l = 0,1,\cdots,p. \tag{2.38}$$

此外，若令 $r_{-1}(z)=0$ 和

$$r_l(z) = \frac{l}{z}r_{l-1}(z) - \frac{1}{z}h_l(z),\ l = 0, 1, \cdots, p,$$

不难验证

$$r_l(z) = \frac{l!}{z^{l+1}}\left(r(z) - \sum_{j=0}^{l}\frac{z^j}{j!}\right) - \sum_{j=1}^{m}\beta_j^l q_j(z),$$

$$l = 0, 1, \cdots, p-1,$$

$$r_p(z) = \frac{p!}{z^{p+1}}\left(r(z) - \sum_{j=0}^{p}\frac{z^j}{j!}\right).$$

并且条件 (2.38) 等价于

$$h_l(z) = O(|z|^{p-l}),\ l = 0, 1, \cdots, p. \tag{2.39}$$

现在进一步证明如下定理，由它可以得到构造 p 阶精度格式的一个可行的方法.

定理 2.5 设 $m < p$，则格式 (2.35) 为 p 阶精度的充分与必要条件为下列条件成立：

(i) $r(z) = e^z + O(|z|^{p+1})$，当$|z| \to 0$;

(ii) $r_l(z) = O(|z|^{p-l})$, $l = 0, 1, \cdots, m-1$;

(iii) $\int_0^1 \omega(s)s^j\mathrm{d}s = 0,\ j = 0, 1, \cdots, p-m-1,$

其中 $\omega(s) = \prod_{i=1}^{m}(s - \beta_i)$.

证明 不难证明 (iii) 等价于：存在 $b_1, b_2, \cdots, b_m$ 使得

$$\text{(iii)}'\ \int_0^1 \varphi(s)\mathrm{d}s = \sum_{j=1}^{m} b_j\varphi(\beta_j),\ \forall\varphi \in \Pi_{p-1}.$$

这里，Π_{p-1} 代表所有次数 $\le p-1$ 的多项式集合.

为证必要性，只需证明 (iii)$'$ 对 $\varphi = s^l$, $l = 0, 1, \cdots, p-1$ 成立即可. 由 $r_l(z)$ 的定义和 (i)、(ii), 可知

$$r_l(0) = \frac{1}{l+1} - \sum_{j=1}^{m}\beta_j^l q_j(0) = 0,\ l = 0, 1, \cdots, p-1.$$

因而，若令 $b_j = q_j(0)$, 则有

$$\int_0^1 s^l\mathrm{d}s = \frac{1}{l+1} = \sum_{j=1}^{m} b_j\beta_j^l,\ l = 0, 1, \cdots, p-1.$$

再来看充分性，为此只要证明 (i)、(ii) 和 (iii) 蕴含

$$r_l(z) = O(|z|^{p-l}),\ 对于 l = m, m-1, \cdots, p-1. \tag{2.40}$$

由分部积分和 (i), 我们有

$$\begin{aligned}\frac{z^{l+1}}{l!}\int_0^1 \mathrm{e}^{z(1-s)}s^l\mathrm{d}s &= \mathrm{e}^z - \sum_{j=0}^{l}\frac{z^j}{j!}\\ &= r(z) - \sum_{j=0}^{l}\frac{z^j}{j!} + O(|z|^{p+1}),\ 当 |z| \to 0.\end{aligned}$$

从而

$$r_l(z) = \int_0^1 \mathrm{e}^{z(1-s)}s^l\mathrm{d}s - \sum_{j=1}^{m}\beta_j^l q_j(z) + O(|z|^{p-l}).$$

现将 $\omega(s)$ 表示为 $\sum_{j=0}^{m}\alpha_j s^j$, 其中 $\alpha_m = 1$. 这样由上式和 (iii), 可得

$$\begin{aligned}\sum_{j=0}^{m}\alpha_j r_{j+l}(z) &= \int_0^1 \mathrm{e}^{z(1-s)}s^l\omega(s)\mathrm{d}s + O(|z|^{p-m-l})\\ &= O(|z|^{p-m-l}),\ l = 0, 1, \cdots, p-m-l.\end{aligned}$$

依次令 $l = 0, 1, \cdots, p-m-1$, 按上式进行递推，即可证明 (2.40). 至此定理证毕.

最后，我们介绍构造形如 (2.35) 的全离散格式的方法. 先补充定义：设 $p_0 \le p$, 如果满足条件

$$r_l(z) = 0,\ l = 0, 1, \cdots, p_0 - 1$$

或等价地

$$h_l(z) = 0,\ l = 0, 1, \cdots, p_0 - 1,$$

则称格式 (2.35) 为严格 p_0 阶精度. 对于任给正整数 p 和 m, 假定 $p/2 \le m \le p$. 一个具有 p 阶精度和严格 m 阶精度的格式可以这样来构造. 首先选取一个有理函数 $r(z)$, 让它满足定理 2.5 中的条件 (i); 其次，按条件 (iii) 在区间 $[0,1]$ 上选互异的求积节点 $\{\beta_j\}_{j=1}^m$, 例如在 $p = 2m$ 的情形，$\{\beta_j\}_{j=1}^m$ 是惟一确定的，它是 $[0,1]$ 上的 Gauss 型节点；然后，有理函数 $\{q_j(z)\}_{j=1}^m$ 则由下述方程组决定：

$$\sum_{j=1}^{m}\beta_j^l q_j(z) = \frac{l!}{z^{l+1}}\left(r(z) - \sum_{j=0}^{l}\frac{z^j}{j!}\right),\ l = 0, 1, \cdots, m-1. \tag{2.41}$$

由于 $\{\beta_j\}_{j=1}^m$ 互异，上述方程组的系数矩阵是非奇异的，故存在惟一解 $\{q_j(z)\}_{j=1}^m$, 并知 $q_j(z)$ 与 $r(z)$ 具有共同的分母. 这里，条件 $p \le 2m$ 是用来保证适合 (iii) 之 $\{\beta_j\}_{j=1}^m$ 的存在性.

例 2.1 令 $r(z)$ 为 e^z 的如下 Padé 逼近

$$r(z)=\frac{1+\frac{1}{2}z+\frac{1}{12}z^2}{1-\frac{1}{2}z+\frac{1}{12}z^2}=\mathrm{e}^z+O(|z|^5),\ \text{当}|z|\to 0,$$

则 $p=4$. 取 $\beta_{1,2}=\frac{1}{2}\mp\frac{\sqrt{3}}{6}$ ($m=2$ 时的 Gauss 型节点). 此时, 方程组 (2.41) 为

$$\begin{cases} q_1(z)+q_2(z)=\dfrac{1}{z}(r(z)-1), \\ \left(\dfrac{1}{2}-\dfrac{\sqrt{3}}{6}\right)q_1(z)+\left(\dfrac{1}{2}+\dfrac{\sqrt{3}}{6}\right)q_2(z)=\dfrac{1}{z^2}(r(z)-1-z). \end{cases}$$

由此导出的格式为:

$$\begin{aligned} &\left(I-\frac{1}{2}k\Delta_h+\frac{1}{12}k^2\Delta_h^2\right)U^{n+1} \\ =&\left(I+\frac{1}{2}k\Delta_h+\frac{1}{12}k^2\Delta_h^2\right)U^n \\ &+\frac{1}{2}k\left\{\left(I+\frac{\sqrt{3}}{6}k\Delta_h\right)f\left(t_n+\left(\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{3}}{6}\right)k\right)\right. \\ &\left.+\left(I-\frac{\sqrt{3}}{6}k\Delta_h\right)f\left(t_n+\left(\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{3}}{6}\right)k\right)\right\}. \end{aligned}$$

对于此格式, 经验证 $r_2(z)=0$, 所以它属于 4 阶精度和严格 3 阶精度格式.

例 2.2 $r(z)$ 与例 2.1 相同. 然而, 令 $m=3$ 并取 $\beta_1=0,\beta_2=\frac{1}{2},\beta_3=1$. 因

$$\int_0^1\omega(s)\mathrm{d}s=\int_0^1 s\left(s-\frac{1}{2}\right)(s-1)\mathrm{d}s=0,$$

故定理 2.5 中条件 (iii) 成立. 这样, 由方程组

$$\begin{cases} q_1(z)+q_2(z)+q_3(z)=\dfrac{1}{z}(r(z)-1), \\ \dfrac{1}{2}q_2(z)+q_3(z)=\dfrac{1}{z^2}(r(z)-1-z), \\ \dfrac{1}{4}q_2(z)+q_3(z)=\dfrac{2}{z^3}\left(r(z)-1-z-\dfrac{1}{2}z^2\right) \end{cases}$$

求出 $\{q_j(z)\}_{j=1}^3$ 后，我们导出如下格式：

$$\left(I-\frac{1}{2}k\Delta_h+\frac{1}{12}k^2\Delta_h^2\right)U^{n+1}=\left(I+\frac{1}{2}k\Delta_h+\frac{1}{12}k^2\Delta_h^2\right)U^n$$
$$+k\left\{\left(\frac{1}{6}+\frac{1}{12}k\Delta_h\right)f(t_n)+\frac{2}{3}f\left(t_n+\frac{1}{2}k\right)+\right.$$
$$\left.\left(\frac{1}{6}-\frac{1}{12}k\Delta_h\right)f(t_{n+1})\right\}.$$

由于

$$r_3(z)=\frac{6}{z^4}\left(r(z)-1-z-\frac{1}{2}z^2-\frac{1}{6}z^3\right)$$
$$-\frac{1}{8}q_2(z)-q_3(z)=0,$$

而 $r_i(z)=0$, $i=0,1,2$ 是在 $q_i(z)$ 的定义中假设的，可见，这个格式为严格的 4 阶精度.

§2.3 质量集中方法

本节介绍一个可以大大简化求解计算的修正 Galerkin 有限元法：质量集中方法. 由于这个方法不仅使求解计算量显著降低，同时具有很好的稳定性和收敛性质，所以受到人们的重视.

回忆第一章中所定义的 Galerkin 有限元法. 以热传导问题 (2.1) 为例，在取定有限元空间 S_h 后，此问题的 Galerkin 有限元近似为

$$\begin{cases}\left(\dfrac{\partial u_h}{\partial t},v_h\right)+(\nabla u_h,\nabla v_h)=(f,v_h),\ \forall v_h\in S_h,t>0,\\[2ex] u_h(x,0)=u_h^0(x)\in S_h.\end{cases}\tag{2.42}$$

设 $\{\phi_j(x)\}_{j=1}^{N_h}$ 为空间 S_h 的基底，并将 (2.42) 的解表示为 $u_h(x,t)=\sum\limits_{j=1}^{N_h}\alpha_j(t)\phi_j(x)$，则问题 (2.42) 的矩阵形式为

$$\frac{\mathrm{d}\alpha(t)}{\mathrm{d}t}+M^{-1}B\alpha(t)=M^{-1}F(t),\tag{2.43}$$

其中 $M=(m_{ij})_{N_h\times N_h}$ 和 $B=(b_{ij})_{N_h\times N_h}$ 分别称为"质量矩阵"和"刚度矩阵"，它们的元素为 $m_{ij}=(\phi_i,\phi_j)$ 和 $b_{ij}=(\nabla\phi_i,\nabla\phi_j)$. 若采用向后差商近似 (2.43) 中的微商 $\mathrm{d}\alpha(t_n)/\mathrm{d}t$, 可构造出问题 (2.14) 的如下全离散格式：

$$(I+k_nM^{-1}B)\alpha^n=\alpha^{n-1}+k_nM^{-1}F^n,\ n=1,2,\cdots,\tag{2.44}$$

此即本章第一节中所述向后 Euler-Galerkin 格式. 我们看到, 在这里无论是 (2.43) 还是 (2.44) 的求解均要求计算逆矩阵 M^{-1}. 在有限元法中, M 通常是一个高阶的非奇异矩阵, 计算 $M^{-1}B$ 和 $M^{-1}F$ 所需运算量和存储量是很大的.

所谓的质量集中法, 就是将 (2.43) 和 (2.44) 中的矩阵 M (质量矩阵) 用一个对角矩阵 $\overline{M}=\mathrm{diag}(\overline{m}_{11},\overline{m}_{22},\cdots,\overline{m}_{N_hN_h})$ 去近似替代它, 其中

$$\overline{m}_{ii}=\sum_{j=1}^{N_h}m_{ij},\ i=1,2,\cdots,N_h.$$

换言之, $\overline{M}$ 是由将 M 中每行元素集中起来 (作代数和) 置于该行的对角线位置上. 此时, 方程 (2.43) 和 (2.44) 分别地简化成

$$\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t}+\overline{M}^{-1}B\alpha=\overline{M}^{-1}F \tag{2.45}$$

和

$$(I+k_n\overline{M}^{-1}B)\alpha^n=\alpha^{n-1}+k_n\overline{M}^{-1}F^n,\ n=0,1,\cdots. \tag{2.46}$$

显然, 这样做可以大大简化求解计算, 因为计算 $\overline{M}^{-1}$ 要比计算 M^{-1} 简单得多.

设 $E(t,s)$ 为热传导方程的解算子, 即 $u(t)=E(t,s)u^s$, $t\in[s,+\infty)$ 代表齐次热传导方程满足初始条件: $u|_{t=s}=u^s$ 的解. 由抛物方程的极值性质, 我们知道: 算子 $E(t,s)$ 满足

$$\min\left(0,\min_{x\in\Omega}u^0(x)\right)\le E(t,0)u^0\le\max\left(0,\max_{x\in\Omega}u^0(x)\right),\ \forall t\ge 0.$$

由此可见, 齐次热传导方程的解 $u(x,t)$ 在最大值模的意义下是稳定的, 即有

$$\max_{x\in\Omega}|u(x,t)|\le\max_{x\in\Omega}|u^0(x)|,\ 对任意t\ge 0.$$

质量集中方法的一个重要优点, 就是当剖分满足一定条件时, 相应的离散方程仍然具有上述极值性质. 然而, 对于通常的 Galerkin 有限元法, 连续方程原有的这一性质会遭到破坏. 下面我们来叙述和证明质量集中方法的极值性质.

令 $\overline{E}_h(t,s)$ 代表由质量集中方法 (2.45) 所定义的齐次 ($F=0$) 半离散方程的解算子, 则 $u_h(t)=\bar{E}_h(t,0)u_h^0$ 为齐次半离散方程的解.

定理 2.6 *假定 $\{J_h\}$ 为区域 $\Omega\subset\mathbb{R}^2$ 的三角形正则剖分, 并且其中任意三角形正则剖分族元素的内角不超过 $\pi/2$, 又设 S_h 为 J_h 上的线性有限元空间, 则对任意 $t\ge 0$ 有*

$$\min\left(0,\min_{x\in\Omega}u_h^0(x)\right)\le\overline{E}_h(t,0)u_h^0\le\max\left(0,\max_{x\in\Omega}u_h^0(x)\right). \tag{2.47}$$

特别地, 若令 $u_h(x,t)=\overline{E}(t,0)u_h^0(x)$, 则有

$$\max_{x\in\Omega}|u_h(x,t)|\le\max_{x\in\Omega}|u_h^0(x)|,\ 对任意t\ge 0. \tag{2.48}$$

证明 由前面讨论，已知：若令

$$u_h(x,t)=\overline{E}_h(t,0)u_h^0(x)=\sum_{j=1}^{N_h}\alpha_j(t)\phi_j(x),$$

则 $\alpha(t)=(\alpha_1(t),\alpha_2(t),\cdots,\alpha_{N_h}(t))^{\top}$ 满足方程

$$\frac{\mathrm{d}\alpha(t)}{\mathrm{d}t}+\overline{M}^{-1}B\alpha(t)=0,$$

此方程的解可表示为

$$\alpha(t)=\left\{\exp(-\overline{M}^{-1}Bt)\right\}\alpha(0)=G(t)\alpha(0).$$

如果证明 $G(t)=(g_{ij}(t))$ 满足条件：

$$\text{(i)}\ \ G(t)\geq 0(\text{非负矩阵}),$$

$$\text{(ii)}\ \ \sum_{j=1}^{N_h}g_{ij}(t)\leq 1,\ i=1,2,\cdots,N_h,$$

那么 $\hat{u}_h(x,t)$ 必定能满足不等式 (2.47) 和 (2.48). 至此，需要用到下述矩阵引理

引理 2.2 设 $M=(m_{ij})$ 为正定、对称矩阵，若 $m_{ij}\leq 0$ 当 $i\neq j$，则 $M^{-1}\geq 0$.

现令 $\widetilde{B}=\overline{M}^{-1}B$. 由于

$$G(t)=\exp(-t\widetilde{B})=\lim_{n\to+\infty}\left(I+\frac{t}{n}\widetilde{B}\right)^{-n},$$

并注意到任一非负矩阵的乘幂仍为非负矩阵，即知：若 $\left(I+\frac{t}{n}\widetilde{B}\right)^{-1}\geq 0$，则 $G(t)\geq 0$. 下面先证 B 的非对角元素 $b_{ij}=(\nabla\phi_i,\nabla\phi_j)\leq 0$. 显然，

$$b_{ij}=\sum_{e\in J_h}(\nabla\phi_i)_e\cdot(\nabla\phi_j)_e\cdot S_e$$

其中 $(\nabla\phi_i)_e$ 代表 $\nabla\phi_j$ 在 e 上的限制，S_e 为单元 e 的面积. 从几何上看，$(\nabla\phi_i)_e$ 表示 e 中顶点 P_i 的对边的法方向，因此，由 e 的内角 $\leq\pi/2$ 的假设，可推知 $(\nabla\phi_i)_e$ 和 $(\nabla\phi_j)_e$ 的夹角为钝角 $(>\pi/2)$，从而

$$(\nabla\phi_i)_e\cdot(\nabla\phi_j)_e\leq 0,\ \text{当}i\neq j, \tag{2.49}$$

即有 $b_{ij}\leq 0$，当 $i\neq j$. 又因 $\overline{M}^{-1}$ 为对角矩阵且其对角元素皆为正数，所以 $\widetilde{B}$ 的非对角元素也小于或等于零，于是矩阵 $\left(I+\frac{t}{n}\widetilde{B}\right)$ 亦然. 现对矩阵 $M=\left(I+\frac{t}{n}\widetilde{B}\right)$

应用引理 2.2. 显然, 对任给 t, 在 n 充分大时, 引理条件成立, 从而 $\left(I+\frac{t}{n}\widetilde{B}\right)^{-1}\geq 0$ 并由此可推出 $G(t)\geq 0$. 为验证条件 (ii), 令 ζ 代表分量全为 1 的向量, 则 (ii) 等价于 $G(t)\zeta\leq\zeta$. 为此只需证明 $B\zeta\geq 0$, 因为据此可推出

$$(\overline{M}+kB)\zeta\geq\overline{M}\zeta,$$

进而有 $(\overline{M}+kB)^{-1}\overline{M}\zeta=(I+k\widetilde{B})^{-1}\zeta\leq\zeta$ 和

$$G(t)\zeta=\left\{\exp(-t\widetilde{B})\right\}\zeta=\lim_{n\to\infty}\left(I+\frac{t}{n}\widetilde{B}\right)^{-n}\zeta\leq\zeta.$$

现在来证 $B\zeta\geq 0$. 为此, 将 S_h 的基函数 $\{\phi_j\}_{j=1}^{N_h}$ 加以扩充, 即增加相应于边界节点的那些基函数 $\{\phi_{N_h+l}\}_{l=1}^{M_h}$. 这样一来, 我们有 $\sum\limits_{j=1}^{N_h+M_h}\phi_j(x)\equiv 1$, 对任意 $x\in\Omega$, 从而有

$$\begin{aligned}(B\zeta)_j&=\sum_{l=1}^{N_h}b_{jl}=\sum_{l=1}^{N_h}(\nabla\phi_j,\nabla\phi_l)\\&=\left(\nabla\phi_j,\nabla\sum_{l=1}^{N_h+M_h}\phi_l\right)-\sum_{l=1}^{M_h}(\nabla\phi_j,\nabla\phi_{N_h+l})\\&=-\sum_{l=1}^{M_h}(\nabla\phi_j,\nabla\phi_{N_h+l})\end{aligned}$$

类似于 (2.49), 可以证明: 对任一内点 P_j 和边界点 P_{N_h+l} 有 $(\nabla\phi_j,\nabla\phi_{N_h+l})\leq 0$, 因此 $B\zeta\leq 0$, 至此定理证毕.

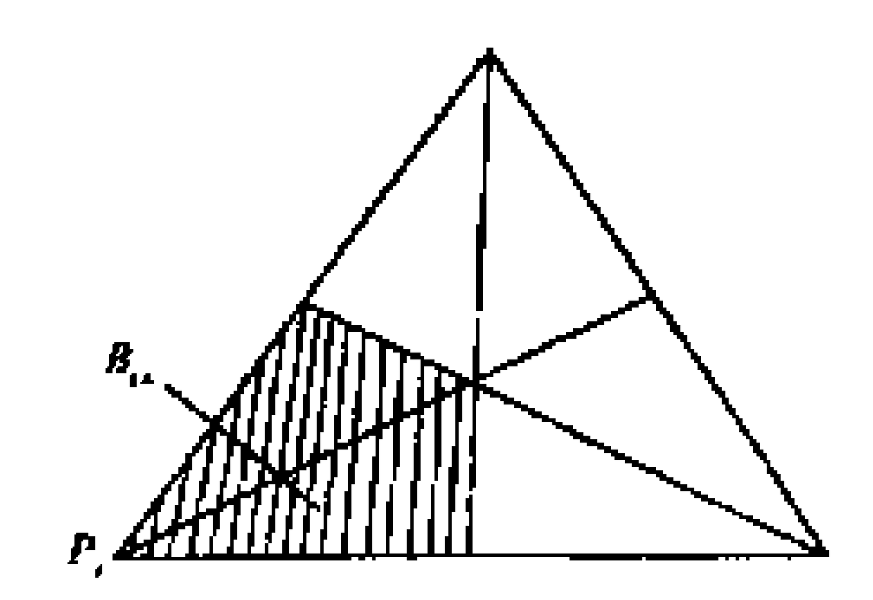
设 $U^n(x)=\sum\limits_{j=1}^{N_h}\alpha^n\phi_j(x)$ 为质量集中全离散格式所定义的近似解, 其中 $\{\alpha^n\}$ 满足方程 (2.46), 可以证明:

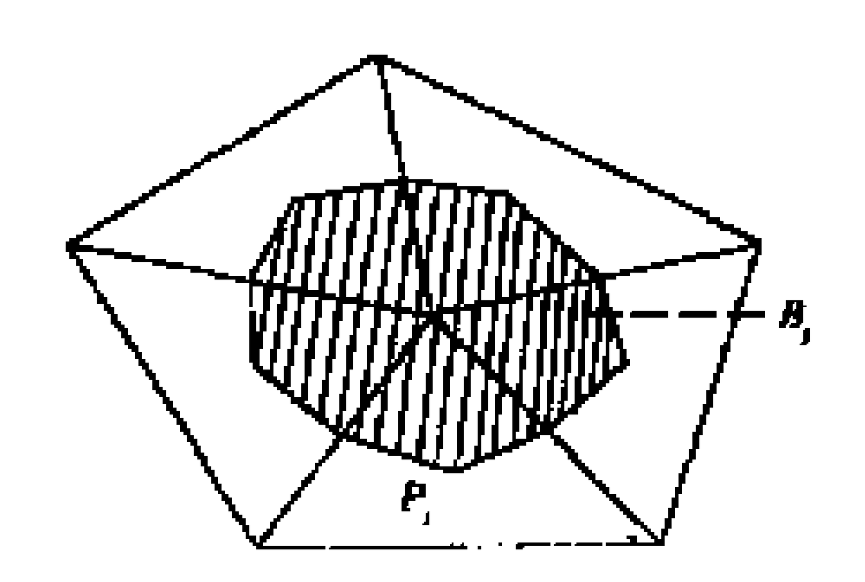
定理 2.7 *在定理 2.6 的假定条件下, 有*

$$\min\left(0,\min_{x\in\Omega}u_h^0(x)\right)\leq U^n(x)\leq\max\left(0,\max_{x\in\Omega}u_h^0(x)\right),\ n\geq 0.$$

这表明, 在一定条件下, 质量集中全离散格式仍然具有极值性质.

现在来讨论质量集中方法的收敛性质. 为此, 我们给出该方法的一个等价描述. 仍设 $\Omega\subset\mathbb{R}^2$. J_h 是区域 Ω 的一个三角形剖分, e 是 J_h 中的一个单元, P_j 为其顶点之一. 作 e 的各个顶点与其对边中点的连线, 它们交于 e 的重心并将 e 分成六个等面积的子三角形. 如图所示, 令 $B_{j,e}$ 是以 P_j 为顶点的两个子三角形的并集. 显然, $B_{j,e}$ 的面积等于单元 e 面积的三分之一. 对于 J_h 的每个内点 P_j, 如图所示, B_j 代表那样一些 $B_{j,e}$ 的并集, 其中 e 是以 P_j 为顶点的单元. 再设 S_h 为 J_h





上的分片线性函数空间，而 $\overline{S}_h$ 是由在每个 B_j 上为常数的函数所组成的空间. 显而易见，S_h 和 $\overline{S}_h$ 中的函数均由其在内点集合 $\{P_j\}_{j=1}^{N_h}$ 上的值惟一确定，所以空间 S_h 和 $\overline{S}_h$ 的维数相等 $(=N_h)$. 对任意 $\overline{v}_h\in\overline{S}_h$, 有表示式

$$\overline{v}_h(x)=\sum_{j=1}^{N_h}\overline{v}_h(P_j)\overline{\phi}_j(x),$$

其中 $\overline{\phi}_j(x)$ 是子区域 B_j 的特征函数，即

$$\overline{\phi}_j(x)=\begin{cases}1,\ 当x\in B_j,\\ 0,\ 当x\notin B_j.\end{cases}$$

若记 $v_h(x)=\sum_{j=1}^{N_h}\overline{v}_h(P_j)\phi_j(x)$, 则 $v_h\in S_h$. 其次，对于任意 $u_h\in S_h$, 可定义 $\overline{S}_h$ 中的一个元素

$$\overline{u}_h(x)=\sum_{j=1}^{N_h}u_h(P_j)\overline{\phi}_j(x),\ x\in\Omega,$$

与其对应.

利用上述空间 $\overline{S}_h$, 前面所述质量集中方法的半离散问题 (2.45) 可等价地转化为求 $u_h(t):[0,\infty)\to S_h$ 使得

$$\begin{cases}\left(\dfrac{\partial\overline{u}_h}{\partial t},\overline{v}_h\right)+(\nabla u_h,\nabla v_h)=(f,v_h),\ \forall v_h\in S_h,t>0,\\ u_h(x,0)=u_h^0(x)\in S_h.\end{cases}\tag{2.50}$$

若令 $u_h(t)=\sum_{j=1}^{N_h}\alpha_j(t)\phi_j(x)$, 则 (2.50) 可写成

$$\sum_{j=1}^{N_h}\frac{\mathrm{d}\alpha_j(t)}{\mathrm{d}t}(\overline{\phi}_j,\overline{\phi}_i)+\sum_{j=1}^{N_h}\alpha_j(t)(\nabla\phi_j,\nabla\phi_i)=(f,\phi_i),$$
$$i=1,2,\cdots,N_h.$$

由此可见，为了证明 (2.50) 与 (2.45) 等价，只需证明：$(\overline{\phi}_j,\overline{\phi}_i)=0$ 当 $j\neq i$ 和 $\|\overline{\phi}_j\|^2=\sum_{i=1}^{N_h}(\phi_j,\phi_i)$. 由于 $j\neq i$ 时，函数 $\overline{\phi}_j$ 与 $\overline{\phi}_i$ 的支集 (B_j 和 B_i) 无公共内点，故 $(\overline{\phi}_j,\overline{\phi}_i)=0$ 当 $j\neq i$. 再用直接计算方法证明另一等式. 设 P_j 和 P_i 为相邻节点，e 是以 $\overline{P_jP_i}$ 为边的一个单元，由计算，

$$\int_e \phi_j\phi_i \mathrm{d}x=\frac{1}{12}e\text{的面积}=\frac{1}{4}B_{j,e}\text{的面积},$$

$$\int_e \phi_j^2 \mathrm{d}x=\frac{1}{6}e\text{的面积}=\frac{1}{2}B_{j,e}\text{的面积}.$$

因为以 $\overline{P_jP_i}$ 为边的单元共计两个，故有

$$\sum_{j\neq i}(\phi_j,\phi_i)=\frac{1}{2}B_j\text{的面积}.$$

类似地，有 $\|\overline{\phi}_j\|^2=\frac{1}{2}B_j$的面积, 从而

$$\sum_{i=1}^{N_h}(\phi_j,\phi_i)=B_j\text{的面积}=\|\overline{\phi}_j\|^2.$$

借助等价的表述形式 (2.50), 可以证明由质量集中方法 (2.45) 所定义的半离散近似解 $u_h(t)$ 的收敛性和如下误差估计.

定理 2.8 设 $\{J_h\}$ 为区域 $\Omega\subset\mathbb{R}^2$ 的正则三角形正则剖分族，S_h 为 J_h 上的线性有限元空间，则质量集中方法 (2.50) 所定义的近似解 $u_h(t)\in S_h, t\geq 0$ 满足如下误差估计：

$$\|u_h(t)-u(t)\|\leq C\|u_h^0-u^0\|+Ch^2\left\{\|u^0\|_2 +\|u(t)\|_2+\left(\int_0^t\|u_t(s)\|_2^2\mathrm{d}s\right)^{\frac{1}{2}}\right\},$$

$$\|\nabla(u_h(t)-u(t))\|\leq\|\nabla(u_h^0-u^0)\|+Ch\left\{\|u^0\|_2 +\|u(t)\|_2+\left(\int_0^t\|u_t(s)\|_1^2\mathrm{d}s\right)^{\frac{1}{2}}\right\}.$$

首先，证明如下引理.

引理 2.3 对任意 $v_h,w_h\in S_h$，有

$$|(\overline{v}_h,\overline{w}_h)-(v_h,w_h)|\leq Ch^2\|\nabla v_h\|\cdot\|\nabla w_h\|. \tag{2.51}$$

证明 令 e 为剖分 J_h 中以 $P_{e,j}$, $j=1,2,3$ 为顶点的三角形单元. 考虑 e 上的求积公式:

$$Q_{e,h}(f)=\frac{1}{3}\sum_{j=1}^{3}f(P_{e,j})\cdot S_e,\ S_e:\text{e的面积},$$

显然, 当 f 在 e 上是一个线性函数时, $Q_{e,h}(f)=\int_e f\mathrm{d}x$. 一般情形, 有

$$|Q_{e,f}(f)-\int_e f\mathrm{d}x|\le Ch^2\sum_{|\alpha|=2}\|D^\alpha f\|_{L^1(e)}.$$

现令 $f=v_h\cdot w_h$, 由于 v_h 和 w_h 在 e 上均为线性函数, 故有

$$\begin{aligned}|Q_{e,h}(v_hw_h)-\int_e v_hw_h\mathrm{d}x|&\le Ch^2\sum_{|\alpha|=2}\|D^\alpha(v_hw_h)\|_{L^1(e)}\\&\le Ch^2\|\nabla v_h\|_{L^2(e)}\|\nabla w_h\|_{L^2(e)}.\end{aligned}$$

上式对 $e\in J_h$ 求和并应用 Schwarz 和 Cauchy 不等式即可证明引理的估计式.

定理 2.8 的证明:

仿 Galerkin 有限元法的收敛性分析 (见第一章 §1.3), 令 $u_h-u=\theta_h+\eta$, 其中 $\eta=P_1u-u$, $\theta_h=u_h-P_1u\in S_h$, P_1 为椭圆投影算子. 已知 (第一章中引理 1.1)

$$\|\eta(t)\|=\|P_1u(t)-u(t)\|\le Ch^2\|u(t)\|_2,$$

剩下只需估计 $\theta_h(t)$. 引用记号: 对 $v_h,w_h\in S_h$, 令

$$(v_h,w_h)_h=(\overline{v}_h,\overline{w}_h),\ \|v_h\|_h=(v_h,v_h)_h^{\frac{1}{2}},$$

$$\varepsilon_h(v_h,w_h)=(v_h,w_h)_h-(v_h,w_h),$$

则对任意 $v_h\in S_h$ 有

$$\begin{aligned}&(\theta_{h,t},v_h)_h+(\nabla\theta_h,\nabla v_h)\\&=(f,v_h)-(P_1u_t,v_h)_h-(\nabla P_1u,\nabla v_h)\\&=(u_t,v_h)-(P_1u_t,v_h)_h\\&=-(\eta_t,v_h)-\varepsilon_h(P_1u_t,v_h).\end{aligned}\tag{2.52}$$

在上式中取 $v_h=\theta_h$, 得到

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\theta_h\|_h^2+\|\nabla\theta_h\|^2=-(\eta_t,\theta_h)-\varepsilon_h(P_1u_t,\theta_h).$$

由于

$$|(\eta_t,\theta_h)|\le\|u_t-P_1u_t\|\cdot\|\theta_h\|\le Ch^2\|u_t\|_2\|\nabla\theta_h\|,$$

又由引理 2.3,

$$\begin{aligned}|\varepsilon_h(P_1u_t,\theta_h)| &\le Ch^2\|\nabla P_1u_t\|\cdot\|\nabla\theta_h\|\\ &\le Ch^2\|u_t\|_2\cdot\|\nabla\theta_h\|,\end{aligned}$$

故有

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\theta_h\|_h^2+\|\nabla\theta_h\|^2\le Ch^2\|u_t\|_2\cdot\|\nabla\theta_h\|\\ &\le\|\nabla\theta_h\|^2+Ch^4\|u_t\|_2^2\end{aligned}$$

或者 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\theta_h\|_h^2\le Ch^4\|u_t\|_2^2$. 由此可得

$$\|\theta_h(t)\|_h^2\le\|\theta_h(0)\|_h^2+Ch^4\int_0^t\|u_t(s)\|_2^2\mathrm{d}s.$$

注意，在空间 S_h 上 $\|\cdot\|_h$ 与 $\|\cdot\|$ 为等价范数 (关于 h 一致), 从而有

$$\|\theta_h(t)\|\le C\|\theta_h(0)\|+Ch^2\left(\int_0^t\|u_t(s)\|_2^2\mathrm{d}x\right)^{\frac{1}{2}},$$

其中

$$\begin{aligned}\|\theta_h(0)\| &=\|u_h^0-P_1u^0\|\\ &\le\|u_h^0-u^0\|+Ch^2\|u^0\|_2.\end{aligned}$$

综合以上估计，定理的第一个估计式得证.

为证定理的第二个估计式，在 (2.52) 中取 $v_h=\theta_{h,t}$, 得到

$$\|\theta_{h,t}\|_h^2+\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\nabla\theta_h\|^2=-(\eta_t,\theta_{h,t})-\varepsilon_h(P_1u_t,\theta_{h,t}).\tag{2.53}$$

类似于前面，有

$$|(\eta_t,\theta_{h,t})|\le\|u_t-P_1u_t\|\,\|\theta_{h,t}\|\le Ch\|\nabla u_t\|\,\|\theta_{h,t}\|,$$

$$\begin{aligned}|\varepsilon_h(P_1u_t,\theta_{h,t})| &\le Ch^2\|\nabla P_1u_t\|\cdot\|\nabla\theta_{h,t}\|\\ &\le Ch^2\|\nabla u_t\|\cdot\|\nabla\theta_{h,t}\|\\ &\le Ch\|\nabla u_t\|\cdot\|\theta_{h,t}\|,\end{aligned}$$

第二式的最后一步用到逆不等式,

$$\|\nabla v_h\|\le Ch^{-1}\|v_h\|,\ \forall v_h\in S_h.$$

将它们代入 (2.53), 我们得到

$$\begin{aligned}&\|\theta_{h,t}\|_h^2+\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\nabla\theta_h\|^2\le Ch\|\nabla u_t\|\cdot\|\theta_{h,t}\|_h\\ &\le\|\theta_{h,t}\|_h^2+Ch^2\|u_t\|_1^2,\end{aligned}$$

于是，有 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\nabla\theta_h\|^2\le Ch^2\|u_t\|_1^2$, 对 t 积分后得到

$$\|\nabla\theta_h(t)\|^2 \le \|\nabla\theta_h(0)\|^2 + Ch^2\int_0^t \|u_t(s)\|_1^2\mathrm{d}s$$
$$\le \|\nabla(u_h^0 - u^0)\|^2 + Ch^2\left\{\|u^0\|^2 + \int_0^t \|u_t(s)\|_1^2\mathrm{d}s\right\}.$$

此估计与已知估计 (见第一章引理 1.1)

$$\|\nabla\eta(t)\| = \|\nabla(P_1u - u)\| \le Ch\|u(t)\|_2$$

相结合，即可证明定理的第二个估计式.

将定理 2.8 所得收敛性估计与第一章中给出的 Galerkin 有限元法的收敛性估计加以比较，便可看出，质量集中方法具有与通常 Galerkin 有限元法同等的逼近精度，然而前者的求解计算量比后者要小得多.

§2.4 一个半线性抛物问题：核反应堆的数学模型

本节介绍有限元法对于一类非线性抛物问题 (反应扩散问题) 的应用. 这类问题是求解形如

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = f(x,u), \quad x\in\Omega, t>0 \tag{2.54}$$

的半线性抛物方程 (组), 其中 $-\Delta u$ 代表扩散，而 $f(x,u)$ 属于反应项. 方程 (2.54) 的定解问题，因其非线性的属性，可能不存在整体解，即解在某个有限时刻发生爆破 (blow up) 的现象. 但在讨论数值计算方法的时候，一般总是假定求解问题在一个有限的时间区间 $(0,T)$ 内存在惟一解 $u(x,t)$, 并且此解具有足够的光滑性.

下述核反应堆的数学模型就是反应扩散问题的一个例子：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \mu\Delta u = u(\lambda v - r), & \\ & x\in\Omega, 0<t\le T, \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} - \Delta v = eu, & \\ \dfrac{\partial u}{\partial n} = \dfrac{\partial v}{\partial n} = 0, & x\in\partial\Omega, 0<t\le T, \\ u(x,0) = u^0(x), & \\ & x\in\bar{\Omega}, \\ v(x,0) = v^0(x), & \end{cases} \tag{2.55}$$

其中 $\Omega\subset\mathbb{R}^3$ 代表反应堆容器占据的空间，$u(x,t)$ 表示中子通量，$v(x,t)$ 是反应堆内的温度分布，$\lambda>0$ 为温度反馈常数 (以下设 $\lambda=1$), μ、r、e 为其他物理参数. 在边值条件中，$\dfrac{\partial u}{\partial n}|_{\partial\Omega}=0$ 表示中子通量不能穿越容器壁，$\dfrac{\partial v}{\partial n}|_{\partial\Omega}=0$ 则表示容器的表面是绝热的.

记 $A=\max\limits_{\bar\Omega} u^0(x)$, $B=\max\limits_{\bar\Omega} v^0(x)$ 和 $a=\min\limits_{\bar\Omega} u^0(x)$, $b=\min\limits_{\bar\Omega} v^0(x)$. 利用上、下解方法，已获得关于初边值问题 (2.55) 的以下理论结果 (参看 [5]).

定理 2.9 设 $B<r$, 如果 $A\le (r-B)^2/2e$, 则问题 (2.55) 存在整体解 $u(x,t)$; 此外，设 $u^0(x)\ge 0$ 且不恒等于零，如果 $\bar v^0=\dfrac{1}{|\Omega|}\displaystyle\int_\Omega v^0(x)\mathrm{d}x\ge r$, 则问题 (2.55) 的解在有限时刻爆破，特别 $b\ge r$ 属于这一情形.

下面着手建立问题 (2.55) 的一个有限元近似. 首先，此问题的变分陈述为：求映射 $u(t)$ 和 $v(t):[0,T]\to H^1(\Omega)$, 满足

$$\begin{cases}\left(\dfrac{\partial u}{\partial t},\chi\right)+\mu(\nabla u,\nabla\chi)=(u(v-r),\chi), \\ \left(\dfrac{\partial v}{\partial t},\chi\right)+(\nabla v,\nabla\chi)=e(u,\chi), \qquad \forall\chi\in H^1(\Omega), \\ u(0)=u^0,\ v(0)=v^0.\end{cases} \tag{2.56}$$

于此，Ω 是一个三维有界区域. 为更适应 Ω 的几何形式，选用四面体作单元，即将 Ω 剖分成有限个四面体元素，每个四面体元具有 4 个顶点 (见图 2.1), 以顶点上函数值 $u(P_i), i=1,2,3,4$ 为参数 (插值中的型值) 可确定单元上的一个线性函数 (三元一次多项式). 由此形成的有限元空间 S_h 是由所有整体连续、在每一个单元上为一次多项式的函数组成的，其维数等于属于 $\bar\Omega$ 的单元顶点的总数. 另外，$S_h\subset H^1(\Omega)$ 具有 §1.2 所述逼近性质 (1.10), 其中 $r=2$.

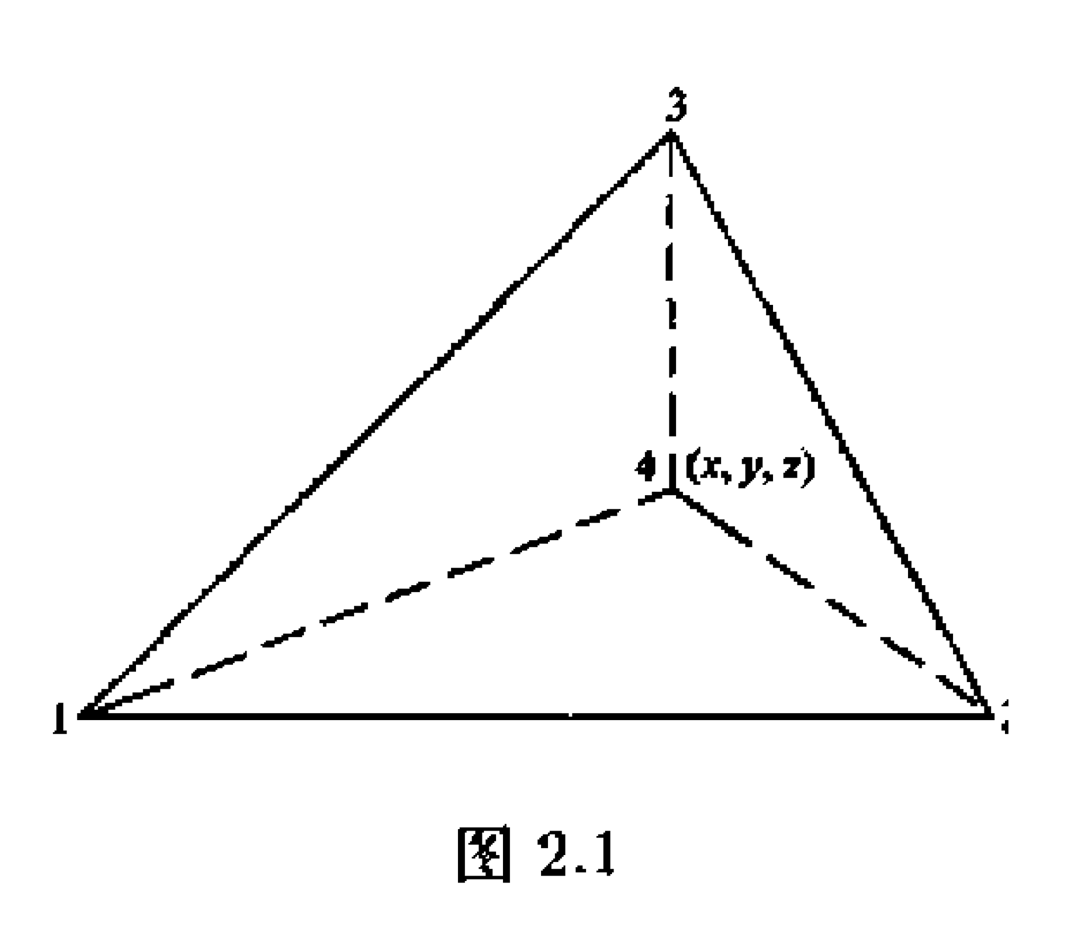


图 2.1

基于空间 S_h, 问题 (2.56) 的 Galerkin 有限元近似为：求映射 $u_h(t)$ 和 $v_h(t):[0,T]\to S_h$, 使得

$$\begin{cases}\left(\dfrac{\partial u_h}{\partial t},\chi\right)+\mu(\nabla u_h,\nabla\chi)=(u_h(v_h-r),\chi), \\ \left(\dfrac{\partial v_h}{\partial t},\chi\right)+(\nabla v_h,\nabla\chi)=e(u_h,\chi),\quad \forall\chi\in S_h, \\ u_h(0)=u_h^0,\ v_h(0)=v_h^0,\end{cases} \tag{2.57}$$

其中 u_h^0 和 v_h^0 分别是函数 $u^0(x)$ 和 $v^0(x)$ 在 S_h 中的某个近似. 令 $\{\phi_i(x)\}_{i=1}^{N_h}$ 为空间 S_h 的基底，并设

$$u_h(x,t)=\sum_{i=1}^{N_h}\alpha_i(t)\phi_i(x),\ v_h(x,t)=\sum_{i=1}^{N_h}\beta_i(t)\phi_i(x),$$

则半离散模型 (2.57) 等价于 $\{\alpha_i(t),\beta_i(t)\}_{i=1}^{N_h}$ 的一个一阶常微分方程组.

为构造全离散格式，取正整数 N，令 $k=\dfrac{T}{N}, t_n=nk, 0\le n\le N$，并记 $\bar{\partial}_t U^n=(U^n-U^{n-1})/k$，我们给出求解问题 (2.57) 的下述全离散计算格式：

$$(\bar{\partial}_t U^n,\chi)+\mu(\nabla U^n,\nabla\chi)=(U^{n-1}(V^{n-1}-r),\chi),$$

$$(\bar{\partial}_t V^n,\chi)+(\nabla V^n,\nabla\chi)=e(U^{n-1},\chi),\quad \forall\chi\in S_h, \tag{2.58}$$

$$U^0=u_h^0,\ V^0=v_h^0,\quad n=1,2,\cdots,N.$$

此格式的计算步骤为：先由第三式得到 (U^0,V^0)，然后对 $n=1,2,\cdots,N$ 由前两式以递推方式求出 (U^1,V^1), (U^2,V^2), $\cdots$, (U^N,V^N)，每步计算只需求解一个线性代数方程组. 显然，问题 (2.58) 的解 (U^n,V^n) 是存在并且惟一的.

最后讨论一下近似解 (U^n,V^n) 的收敛性. 设 $(u(x,t),v(x,t))$ 是初边值问题 (2.55) 在时间区间 $[0,T]$ 内的惟一解，并且满足正则性条件

$$u,v,u_t,v_t,u_{tt},v_{tt}\in L^\infty(0,T;H^3). \tag{2.59}$$

与前面一节的做法类似，在收敛性分析中将真解 (u,v) 的椭圆投影 (P_1u,P_1v) 作为比较的"辅助函数"，这里算子 $P_1: H^1(\Omega)\to S_h$ 的定义为：对任给 $\psi\in H^1(\Omega)$，$P_1\psi\in S_h$ 由下式确定

$$(\nabla P_1\psi,\nabla\chi)=(\nabla\psi,\nabla\chi),\ \forall\chi\in S_h. \tag{2.60}$$

具体作法就是将近似解 (U^n,V^n) 与真解 $(u(t_n),v(t_n))$ 的误差表示为：

$$U^n-u(t_n)=U^n-P_1u(t_n)+P_1u(t_n)-u(t_n)=\theta_1^n+\eta_1^n,$$

$$V^n-v(t_n)=V^n-P_1v(t_n)+P_1v(t_n)-v(t_n)=\theta_2^n+\eta_2^n.$$

由算子 P_1 的逼近性质 (见第一章引理 1.1)，可以给出 $\eta_i^n(i=1,2)$ 的如下估计

$$\|\eta_i^n\|+h\|\eta_i^n\|_1\le Ch^2\|u(t_n)\|_2 \tag{2.61}$$

因此剩下只需讨论如何得到 $\theta_i^n(i=1,2)$ 的估计即可.

容易验证，θ_i^n 满足如下方程：

$$\begin{cases}(\bar{\partial}_t\theta_1^n,\chi)+\mu(\nabla\theta_1^n,\nabla\chi) &= (R_1^n,\chi),\\ (\bar{\partial}_t\theta_2^n,\chi)+(\nabla\theta_2^n,\nabla\chi) &= (R_2^n,\chi),\end{cases} \tag{2.62}$$

其中

$$\begin{aligned} R_1^n &= u_t(t_n) - P_1\bar{\partial}_t u(t_n) \\ &\quad + U^{n-1}(V^{n-1} - r) - u(t_n)(v(t_n) - r) \\ &= R_{11}^n + R_{12}^n, \end{aligned} \tag{2.63}$$

$$\begin{aligned} R_2^n &= v_t(t_n) - P_1\bar{\partial}_t v(t_n) + e(U^{n-1} - u(t_n)) \\ &= R_{21}^n + R_{22}^n, \end{aligned} \tag{2.64}$$

由在 (2.62) 的第一式中取 $\chi = \theta_1^n$, 可得

$$(\bar{\partial}_t\theta_1^n, \theta_1^n) \le \|R_1^n\|\ \|\theta_1^n\|$$

或者 $\|\theta_1^n\|^2 \le \|\theta_1^n\|\ \|\theta_1^{n-1}\| + k\|R_1^n\|\ \|\theta_1^n\|$, 于是有

$$\|\theta_1^n\| \le \|\theta_1^{n-1}\| + k\|R_1^n\| \le \|\theta_1^0\| + k\sum_{l=1}^{n}\|R_1^l\|.$$

类似地，在 (2.62) 的第二式中取 $\chi = \theta_2^n$ 可得

$$\|\theta_2^n\| \le \|\theta_2^0\| + k\sum_{l=1}^{n}\|R_2^l\|,$$

将以上两式相加，得到

$$\|\theta_1^n\| + \|\theta_2^n\| \le \|\theta_1^0\| + \|\theta_2^0\| + k\sum_{l=1}^{n}(\|R_1^l\| + \|R_2^l\|). \tag{2.65}$$

因 $R_{21}^l = v_t(t_l) - \bar{\partial}_t v(t_l) + (I - P_1)\bar{\partial}_t v(t_n)$, 由此可证

$$k\sum_{l=1}^{n}\|R_{21}^l\| \le C(T, v)(k + h^2). \tag{2.66}$$

类似地可证

$$k\sum_{l=1}^{n}\|R_{11}^l\| \le C(T, u)(k + h^2). \tag{2.67}$$

其次，因 $R_{22}^l = e\theta_1^{l-1} + e(P_1 u(t_{l-1}) - u(t_l))$, 易知

$$k\sum_{l=1}^{n}\|R_{22}^l\| \le ek\sum_{l=0}^{n-1}\|\theta_1^l\| + C(T, u)(k + h^2). \tag{2.68}$$

进一步需要对非线性项

$$R_{21}^l = U^{l-1}(V^{l-1} - r) - u(t_l)(v(t_l) - r)$$

作估计. 于此, 暂时假定

$$\|\theta_i^l\|_{L^\infty(\Omega)} \le M,\ i=1,2,\ 0 \le l \le n-1, \tag{2.69}$$

(通常称此类假定为归纳假设). 另外, 当真解 (u,v) 满足正则条件 (2.59) 时, 它们的 P_1- 投影 $P_1u(t_l)$ 和 $P_1v(t_l)$ 在 $L^\infty(\Omega)$ 范数意义下也是关于 l 和 h 一致有界的. 将 R_{21}^l 中的 $U^{l-1}V^{l-1}$ 表示为 $(\theta_1^{l-1}+P_1u(t_{l-1}))(\theta_2^{l-1}+P_1v(t_{l-1}))$, 不难证明如下估计

$$\|R_{12}^l\| \le C(u,M)\{\|\theta_1^{l-1}\|+\|\theta_2^{l-1}\|+k+h^2\}. \tag{2.70}$$

将以上关于 R_1^l 和 R_2^l 的估计代入 (2.65), 并设 $\|\theta_1^0\|$, $\|\theta_2^0\|=O(h^2)$, 可得

$$\|\theta_1^n\|+\|\theta_2^n\| \le Ck\sum_{l=0}^{n-1}(\|\theta_1^l\|+\|\theta_2^l\|)+C(k+h^2), \tag{2.71}$$

其中常数 C 依赖于 u,v,T 和 M, 但不依赖于 k 和 h. 至此, 利用 Gronwall 不等式 (它是第一章引理 1.2 的离散形式), 得到

$$\|\theta_1^n\|+\|\theta_2^n\| \le C(k+h^2). \tag{2.72}$$

现在, 我们回过头来验证假设 (2.69). 容易看出, 当初值 (U^0,V^0) 取为 (P_1u^0, P_1v^0) 或者 (Iu^0,Iv^0) 时, 假设 (2.69) 对于 $l=0$ 成立. 根据前面的论证, 如果 (2.69) 对于 $l=1,2,\cdots n-1$ 成立, 则可推出估计式 (2.72). 借助空间 S_h 的 "逆估计" (见 [1], Chapt. 3, §3.2)

$$\|v_h\|_{L^\infty(\Omega)} \le Ch^{-\frac{3}{2}}\|v_h\|_{L^2(\Omega)}, \tag{2.73}$$

由 (2.72) 可推出

$$\|\theta_i^n\|_{L^\infty(\Omega)} \le C(kh^{-\frac{3}{2}}+h^{\frac{1}{2}}),\ i=1,2.$$

因此, 如果 $k=O(h^{\frac{3}{2}})$ 成立, 则在 h 适当小时条件 (2.69) 对于 $l=n$ 亦成立. 这样可以看出假设 (2.69) 在 $k=O(h^{\frac{3}{2}})$ 和 h 适当小情形是成立的. 最后, 将估计式 (2.61) 和 (2.72) 结合一起, 即证明了全离散近似解 (U^n,V^n) 的收敛性, 并得到误差估计

$$\|U^n-u(t_n)\|,\|V^n-v(t_n)\| \le C(u,T)(k+h^2). \tag{2.74}$$

注 对于某些非线性问题, 若能通过能量估计法证明近似解的一致有界性, 此时在收敛性分析中就不必作 "归纳假设" 了.

第三章　对流 - 扩散问题的数值解法

同时伴有物质输运和分子扩散的物理过程以及黏性流体的流动，其数学模型通常为对流 - 扩散方程或含有此类方程的偏微分方程组的定解问题. 对流 - 扩散问题数值计算方法的研究具有重要的理论和实际意义，可应用于环境科学、能源开发、流体力学和电子科学等许多领域. 本章介绍近二十余年来针对这类问题创立并得到迅速发展的一些新的数值方法. §3.1 介绍对流占优扩散问题的背景. §3.2 介绍有限体积法和广义差分法. §3.3 介绍特征有限元法. §3.4 介绍一个应用问题，即多孔介质中两相可混溶驱动的数值模拟方法.

§3.1　对流占优扩散问题的背景

本节以地下水污染的数学模型来说明对流占优扩散问题的背景及其特点.

由于工厂、矿山排放污水，农业生产使用化肥、农药，它们随着雨水、排灌或其他途径进入地下，通过渗流使地下水受到污染. 一些溶解在水中的溶质既会随地下水作对流运动，也会在溶液中作分子扩散运动，用数值方法模拟、研究地下污水的运动规律和进行预测是水文地质、环境科学中的一个重要课题.

描写化学溶质 (污水) 运动规律的数学方程为

$$\frac{\partial(mc)}{\partial t}=\operatorname{div}(mD\nabla c)-\operatorname{div}(mc\underline{v})-Q, \tag{3.1}$$

其中

c : 溶质浓度;　　m : 介质孔隙系数;

$\underline{v}=(v_1,v_2,v_3)^{\mathrm{T}}$: 流场速度，假定已知;

D : 弥散系数张量;　　Q : 注入或抽出的源项.

右端第一项为扩散项、第二项则是对流项. 在这类问题中，溶质分子的扩散相对于水流速度而言是缓慢的，对流占主导地位，因而属于对流占优扩散问题.

由于方程 (3.1) 中的对流项占主导地位，可视作是一阶双曲方程

$$\frac{\partial(mc)}{\partial t}+\operatorname{div}(mc\,\underline{v})+Q=0$$

的小扰动方程，因此它具有双曲方程的特点. 此类方程定解问题的解常常出现局部剧烈 (大梯度) 变化，如含有边界层、瞬变层等，这给数值求解计算带来一定的困难. 数值实验表明，这类问题用标准的 Galerkin 有限元法求解往往在急剧变化地带增生振荡现象，分辨率低等缺点. 因此，近年来人们关于这类数值方法的研究，大都倾向各种非标准的有限元法，如有限体积法、广义差分法、特征有限元法等.

§3.2 有限体积法和广义差分法

有限体积法和广义差分法是在有限元法和差分法的基础上发展起来的新型数值方法 (参看 [17]~[19]), 本节以对流 - 扩散问题为例介绍上述方法.

设 $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ 是一个有界区域, $x = (x_1, x_2) \in \Omega$. 考虑如下线性对流 - 扩散问题:

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial u}{\partial t} + \underline{b} \cdot \nabla u - \mu \Delta u = 0, \qquad x \in \Omega, \quad t > 0, \\
\left(\underline{b} \cdot \nabla = b_1 \dfrac{\partial}{\partial x_1} + b_2 \dfrac{\partial}{\partial x_2} \right), \\
u = 0, \qquad x \in \Gamma = \partial\Omega, \quad t > 0, \\
u(x, 0) = u^0,
\end{cases}
\tag{3.2}
$$

其中 $\mu > 0$ 和 b_1, b_2 为常数, 并设 $\mu << |\underline{b}|$.

有限体积法

设 $\Omega_h = \{K\}$ 为空间区域 $\overline{\Omega}$ 的正则三角剖分, K 表示剖分 Ω_h 中的三角形单元, Ω_h 中所有三角形顶点组成的节点集合为 $\{P_i : 1 \le i \le M_2\}$, 其中 $\{P_i : 1 \le i \le M_1\}$ 为内节点集合, 而 $\{P_i : M_1 + 1 \le i \le M_2\}$ 为边界节点集合. h 代表 Ω_h 中所有单元的最大直径. 设函数空间 $U_h \subset H_0^1(\Omega)$ 为剖分 Ω_h 上的标准线性有限元空间, 其基函数为 $\{\phi_i(x)\}_{i=1}^{M_1}$, 满足条件 $\phi_i(P_j) = \delta_{ij}, 1 \le i, j \le M_1$ 和零边值条件 $\phi_i(P_j) = 0$, 对于 $1 \le i \le M_1, M_1 + 1 \le j \le M_2$.

其次, 按下述方法建立 Ω_h 的对偶剖分. 对于任一三角形单元 $K \in \Omega_h$, 在 K 内选定一点 Q, 并作此点与 K 的各边中点的连线, 则 K 被分成三个小三角形. 对任意节点 P_i, 考虑所有以 P_i 为公共顶点的单元, 将所有以 P_i 为顶点的小三角形的并集记为 $K_{P_i}^*$, 它是一个多边形子区域, 被称为对偶单元. 所有对偶单元的集合便构成 Ω_h 的一个对偶剖分, 记为 Ω_h^*. 当 Q 点选作 K 的重心时, 相应的 Ω_h^* 称为重心对偶剖分, 见图 3.2. 当 Ω_h 中任一单元的内角均为钝角 ($< \pi/2$) 时, 亦可选取单元的外心作为 Q 点, 此时相应的 Ω_h^* 称为外心对偶剖分, 见图 3.1. 上述两种对偶剖分是最主要和经常用到的.

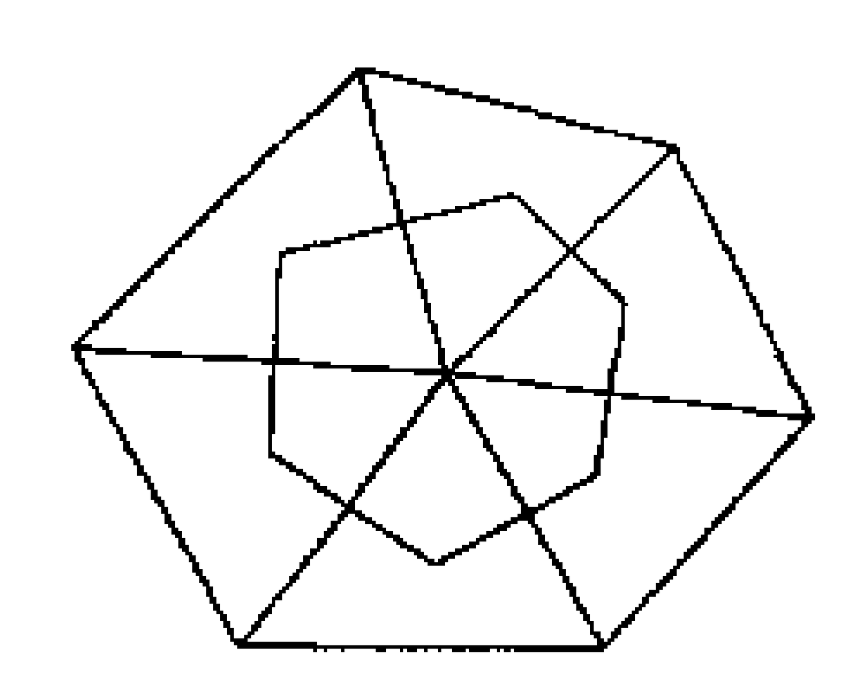


图 3.1 外心对偶剖分

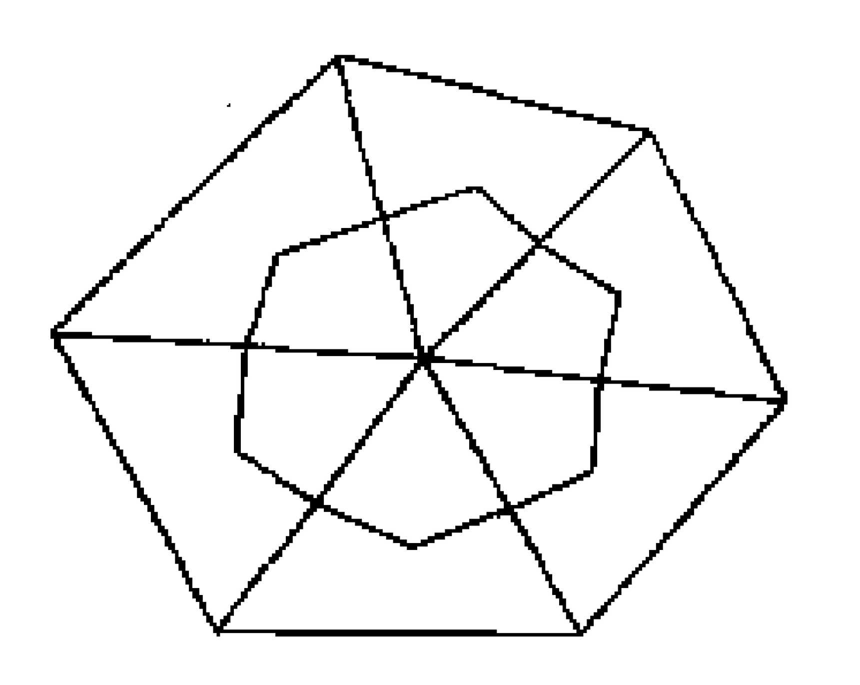


图 3.2 重心对偶剖分

令 V_h 代表 Ω_h^* 上所有分片常数且于 $K_{P_i}^*(M_1+1\le i\le M_2)$ 上取零值的函数集合，此空间的基函数为

$$\phi_i^*(P)=\begin{cases}1, & P\in K_{P_i}^*,\\ 0, & P\,\overline{\in}\,K_{P_i}^*,\end{cases}\qquad 1\le i\le M_1.$$

引进插值投影算子 $\Pi_h: C_0(\overline{\Omega})\to U_h$

$$\Pi_h v=\sum_{i=1}^{M_1} v(P_i)\,\phi_i(x) \tag{3.3}$$

以及 $\Pi_h^*: C_0(\overline{\Omega})\to V_h$

$$\Pi_h^* v=\sum_{i=1}^{M_1} v(P_i)\,\phi_i^*(x)\ . \tag{3.4}$$

Ω_h 中两个节点 P_i 和 P_j, 如果它属于某个单元边的端点，则称 P_i 与 P_j 为邻点. 设 P_i 和 P_j 为相邻节点，记 $\Gamma_{ij}=\partial K_{P_i}^*\cap\partial K_{P_j}^*$, ν_{ij} 代表 Γ_{ij} 的单位外法向量.

有限体积法的建立过程是这样的：首先，在 $K_{P_i}^*$(称控制体积) 上积分方程 (3.2), 得

$$\int_{K_{P_i}^*}\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\underline{b}\cdot\nabla u-\mu\triangle u\right)\,\mathrm{d}x=0\ . \tag{3.5}$$

利用 Green 公式

$$\int_{K_{P_i}^*}\triangle u\,\mathrm{d}x=\int_{\partial K_{P_i}^*}\frac{\partial u}{\partial\nu}\,\mathrm{d}s,$$

$$\int_{K_{P_i}^*}\underline{b}\cdot\nabla u\,\mathrm{d}x=\int_{\partial K_{P_i}^*}-(\underline{b}\cdot\underline{\nu})u\,\mathrm{d}s,$$

$\underline{\nu}$：$\partial K_{P_i}^*$上的单位外法向量

并将其中的 u 改为 u_h, 得到如下积分形式的方程

$$\int_{K_{P_i}^*}\frac{\partial u_h}{\partial t}\,\mathrm{d}x=\int_{\partial K_{P_i}^*}(\underline{b}\cdot\underline{\nu})u_h\,\mathrm{d}s+\mu\int_{\partial K_{P_i}^*}\frac{\partial u_h}{\partial\nu}\,\mathrm{d}s\,, \qquad \forall K_{P_i}^*\in\Omega_h^*\ . \tag{3.6}$$

由于 u_h 是 Ω_h 上的分片线性函数，采用分片和分段积分的方式将上式左右两端的积分计算出来，给出它们的表达公式. 如此，便可建立近似求解问题 (3.2) 的有限体积法的计算格式 (半离散方程).

下面，就 Ω_h^* 为外心对偶剖分的情形讨论一下 (3.6) 的具体形式. 令 $\wedge_i=\{j: P_j与P_i相邻\}$ 表示与 P_i 相邻的节点指标集合，则有

$$\int_{\partial K_{P_i}^*} \frac{\partial u_h}{\partial \nu}\,\mathrm{d}s = \sum_{j\in\Lambda_i} \frac{u_h(P_j)-u_h(P_i)}{|P_iP_j|}|\Gamma_{ij}|,$$

$$\int_{\partial K_{P_i}^*} (\underline{b}\cdot\underline{\nu})u_h\,\mathrm{d}s \approx \sum_{j\in\Lambda_i}\int_{\Gamma_{ij}} \underline{b}\cdot\underline{\nu}\,\mathrm{d}s\frac{u_h(P_i)+u_h(P_j)}{2}, \tag{3.7}$$

$$\int_{K_{P_i}^*} \frac{\partial u_h}{\partial t}\,\mathrm{d}x = |K_{P_i}^*|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{u}_h \approx |K_{P_i}^*|\left.\frac{\mathrm{d}u_h}{\mathrm{d}t}\right|_{P=P_i};$$

其中 $\overline{u}_h$ 代表 u_h 在 $K_{P_i}^*$ 上的平均值, $|K_{P_i}^*|$ 和 $|\Gamma_{ij}|$ 分别代表单元 $K_{P_i}^*$ 的面积和线段 Γ_{ij} 的长度, $|P_iP_j|$ 是连线 $\overline{P_iP_j}$ 的长度. 令 $b_{ij} = \int_{\Gamma_{ij}}(\underline{b}\cdot\underline{\nu})\,\mathrm{d}s$, 并将 u_h 改记为 $u_h(P,t)$, 利用上述积分表达与近似公式, 便可得到如下近似求解的计算格式 (半离散方程):

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}u_h(P_i,t)}{\mathrm{d}t} = & \sum_{j\in\Lambda_i}\frac{b_{ij}}{|K_{P_i}^*|}\frac{u_h(P_i,t)+u_h(P_j,t)}{2} \\ & +\mu\sum_{j\in\Lambda_i}\frac{|\Gamma_{ij}|}{|K_{P_i}^*|}\frac{u_h(P_j,t)-u_h(P_i,t)}{|P_iP_j|}, \\ & i=1,2,\cdots,M_1\,.\end{aligned} \tag{3.8}$$

另外, 若引进 Heaviside 函数 $h(r)$:

$$h(r) = \begin{cases} 1, & 当 r \ge 0; \\ 0, & 当 r < 0. \end{cases}$$

并将前面关于对流项的近似公式 (3.7) 改为

$$\begin{aligned}&\int_{\partial K_{P_i}^*} (\underline{b}\cdot\underline{\nu})\,u_h\,\mathrm{d}s \\ &\quad\approx \sum_{j\in\Lambda_i} b_{ij}\{h(b_{ij})\,u_h(P_i) + (1-h(b_{ij}))\,u_h(P_j)\}.\end{aligned} \tag{3.9}$$

其余各项的近似不变, 此时所得到的格式称为**迎风型有限体积格式**.

出于理论分析和推广的需要, 下面介绍方程 (3.6) 的变分形式. 引进记号

$$b\,(u_h,\phi_i^*) = \int_{\partial K_{P_i}^*}(\underline{b}\cdot\underline{\nu})\,u_h\,\mathrm{d}s, \tag{3.10}$$

$$a\,(u_h,\phi_i^*) = -\mu\int_{\partial K_{P_i}^*}\frac{\partial u_h}{\partial \nu}\,\mathrm{d}s, \tag{3.11}$$

则可将 (3.6) 写成

$$\left(\frac{\partial u_h}{\partial t},\ \phi_i^*\right)+a\left(u_h,\ \phi_i^*\right)=b\left(u_h,\ \phi_i^*\right),\qquad i=1,2,\cdots,M_1. \tag{3.12}$$

因此，求解方程 (3.6) 等价于：求 $u_h(\cdot,t)\in U_h$ 满足：

$$\left(\frac{\partial u_h}{\partial t},\ v_h\right)+a\left(u_h,\ v_h\right)=b\left(u_h,\ v_h\right),\quad \forall v_h\in V_h, \tag{3.13}$$

此即方程 (3.6) 的变分形式，在变分问题 (3.13) 中，U_h 称为 **试探函数空间**(近似解所属空间)，而 V_h 则称为 **检验函数空间**(用来检验解是否满足方程). 此类离散化称为 **Petrov-Galerkin 有限元法**, 它与通常 Galerkin 有限元法的不同之处，就是其中的试探函数空间和检验函数空间是不相同的空间.

广义差分法

传统的差分方法，大多数是在矩形一类规则剖分下通过差分逼近方法建立的，也有过利用积分插值法建立三角网格上的差分格式的尝试，但并未受到重视. 在以变分原理为基础的有限元法出现之后，李荣华教授利用对偶剖分及于其上面恰当选取的有限元空间，将积分插值法改造、推广为变分形式的离散格式，并称之为广义差分法，1982 年以来李荣华及其合作者对广义差分法进行了系统、深入的研究工作 (见 [17]).

仍以初边值问题 (3.2) 为例，简单介绍一下广义差分法.

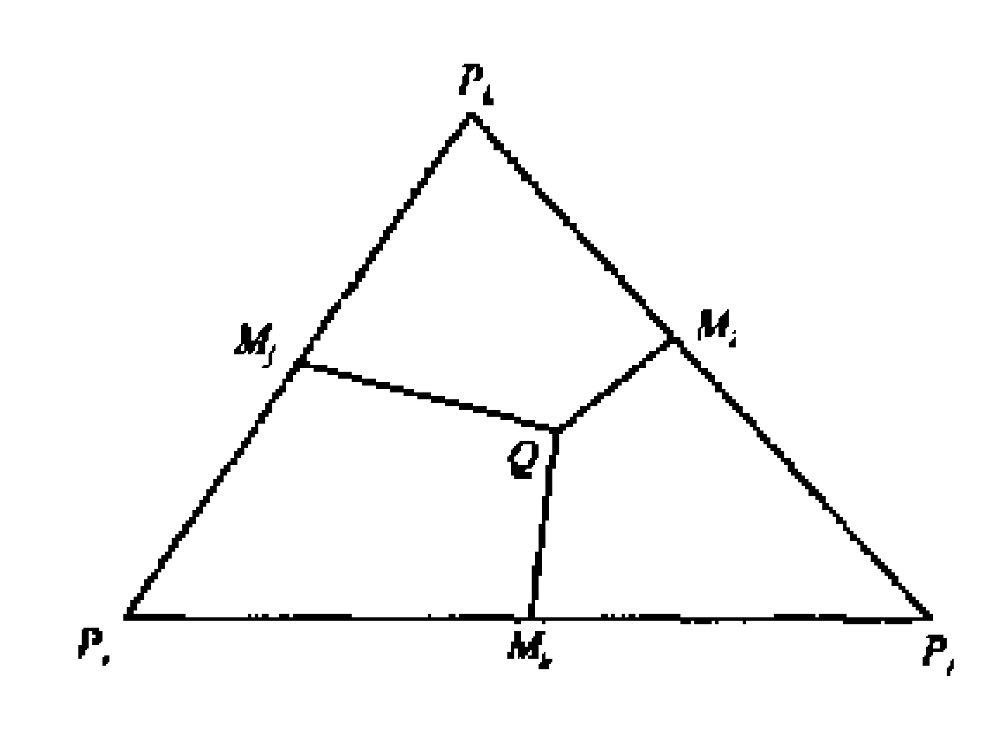
设 Ω_h 和 Ω_h^* 为区域 Ω 的如前所述的剖分和对偶剖分. 于 Ω_h 上选取一个有限维函数空间 $U_h\subset H_0^1(\Omega)$, 此为试探函数空间. 同时，在 Ω_h^* 上构造另一维数与 U_h 相同的函数空间 $V_h\subset L^2(\Omega)$, 当作检验函数空间. 定义

$$b\left(u_h,v_h\right)=\sum_{P_i\in\Omega_h}v_h(P_i)\int_{\partial K_{P_i}^*}(\underline{b}\cdot\underline{\nu})\,u_h\,\mathrm{d}s, \tag{3.14}$$

$$a\left(u_h,v_h\right)=-\mu\sum_{P_i\in\Omega_h}v_h(P_i)\int_{\partial K_{P_i}^*}\frac{\partial u_h}{\partial\nu}\,\mathrm{d}s, \tag{3.15}$$

那么，由变分方程 (3.13) 所定义的格式便是求解问题 (3.2) 的广义差分格式.

特别地，当 U_h 为 Ω_h 上的线性有限元空间和 V_h 为 Ω_h^* 上的分片常数的函数空间，此时 (3.13) 就是有限体积法，它是广义差分法的一个特例. 一般地，通过恰当选取高次的有限元空间 U_h 和 V_h, 可以构造出具有高阶精度的广义差分格式.



关于广义差分法的理论分析 (收敛性和误差估计), 借助其变分形式可以仿照有限元法的分析方法去作. 尽管如此, 论证要比 Galerkin 有限元法复杂许多. 下面, 假定 Ω 为平面有界区域, Ω_h 和 Ω_h^* 为 Ω 的正则三角形剖分和如前所述对偶剖分, 并设 U_h 为 Ω_h 上的分段线性函数空间和 V_h 为 Ω_h^* 上的分片常数函数空间, 以此为例介绍广义差分法的理论分析方法.

首先证明以下几个引理.

引理 3.1　*存在常数 $\gamma > 0$, 使得对任意 $u_h \in U_h$ 有*

$$a(u_h, \Pi_h^* u_h) \geq \gamma \|u_h\|_1^2. \tag{3.16}$$

证明　对于 Ω_h 中任一单元 $K(P_i, P_j, P_k)$, 如图所示, M_i、M_j 和 M_k 分别代表顶点 P_i、P_j 和 P_k 对边之中点. 这里, 允许 Q 是 K 内任意选定的一个点. P_i 点的坐标记为 (x_{1,P_i}, x_{2,P_i}), 其余点的坐标亦用类似记号表示. 对于任意 $u_h \in U_h$, 由于 $u_h(x_1, x_2)$ 在 K 上为线性函数, 从而 $\dfrac{\partial u_h}{\partial x_1}, \dfrac{\partial u_h}{\partial x_2}$ 在 K 上为常数, 根据 Green 公式有

$$-\int_{\widehat{M_jQM_k}} \frac{\partial u_h}{\partial \nu} \mathrm{d}s = \int_{\overline{M_kM_j}} \frac{\partial u_h}{\partial \nu} \mathrm{d}s, \tag{3.17}$$

其中 $\widehat{M_jQM_k}$ 为连接 M_j, Q 和 M_k 的折线, $\overline{M_kM_j}$ 是连接 M_k 和 M_j 的直线段. 注意 $\dfrac{\partial u_h}{\partial \nu} = \dfrac{\partial u_h}{\partial x_1}\mathrm{d}x_2 - \dfrac{\partial u_h}{\partial x_2}\mathrm{d}x_1$, 则有

$$-\int_{\widehat{M_jQM_k}} \frac{\partial u_h}{\partial \nu} \mathrm{d}s = \frac{\partial u_h}{\partial x_1}(x_{2,M_j} - x_{2,M_k}) - \frac{\partial u_h}{\partial x_2}(x_{1,M_j} - x_{1,M_k}). \tag{3.18}$$

类似地, 可证明

$$-\int_{\widehat{M_kQM_i}} \frac{\partial u_h}{\partial \nu} \mathrm{d}s = \frac{\partial u_h}{\partial x_1}(x_{2,M_k} - x_{2,M_i}) - \frac{\partial u_h}{\partial x_2}(x_{1,M_k} - x_{1,M_i}), \tag{3.19}$$

$$-\int_{\widehat{M_iQM_j}} \frac{\partial u_h}{\partial \nu} \mathrm{d}s = \frac{\partial u_h}{\partial x_1}(x_{2,M_i} - x_{2,M_j}) - \frac{\partial u_h}{\partial x_2}(x_{1,M_i} - x_{1,M_j}). \tag{3.20}$$

对任意 $u_h^{(1)}, u_h^{(2)} \in U_h$, 考察单元 $K(P_i, P_j, P_k)$ 上双线性泛函

$$\begin{aligned} I_K(u_h^{(1)}, \Pi_h^* u_h^{(2)}) = & -u_h^{(2)}(P_i) \int_{\widehat{M_jQM_k}} \frac{\partial u_h^{(1)}}{\partial \nu} \mathrm{d}s \\ & -u_h^{(2)}(P_j) \int_{\widehat{M_kQM_i}} \frac{\partial u_h^{(1)}}{\partial \nu} \mathrm{d}s \\ & -u_h^{(2)}(P_k) \int_{\widehat{M_iQM_j}} \frac{\partial u_h^{(1)}}{\partial \nu} \mathrm{d}s. \end{aligned} \tag{3.21}$$

由 (3.18)~(3.20), 可知

$$
\begin{aligned}
I_K(u_h^{(1)},\Pi_h^* u_h^{(2)}) = & \frac{\partial u_h^{(1)}}{\partial x_1}\big[u_h^{(2)}(P_i)(x_{2,M_j}-x_{2,M_k}) \\
& +u_h^{(2)}(P_j)(x_{2,M_k}-x_{2,M_i})+u_h^{(2)}(P_k)(x_{2,M_i}-x_{2,M_j})\big] \\
& +\frac{\partial u_h^{(1)}}{\partial x_2}\big[u_h^{(2)}(P_i)(x_{1,M_k}-x_{1,M_j}) \\
& +u_h^{(2)}(P_j)(x_{1,M_i}-x_{1,M_k})+u_h^{(2)}(P_k)(x_{1,M_j}-x_{1,M_i})\big].
\end{aligned} \tag{3.22}
$$

从表示式 (3.22) 看到, 由 (3.21) 定义的双线性泛函 I_k 实际上是与 Q 点在 K 中的位置无关的.

此外, 利用 K 上的面积坐标 $(\lambda_i,\lambda_j,\lambda_k)$(其定义见 [3]) 不难证明: 对于 $K(P_i,P_j,P_k)$ 上的任一线性函数 $u_h(x_1,x_2)$, 下列计算公式成立:

$$
u_h = u_h(P_i)\lambda_i + u_h(P_j)\lambda_j + u_h(P_k)\lambda_k,
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial u_h}{\partial x_1} = & \frac{1}{S_K}\Big[u_h(P_i)\frac{x_{2,P_j}-x_{2,P_k}}{2} \\
& +u_h(P_j)\frac{x_{2,P_k}-x_{2,P_i}}{2}+u_h(P_k)\frac{x_{2,P_i}-x_{2,P_j}}{2}\Big],\\
\frac{\partial u_h}{\partial x_2} = & \frac{1}{S_K}\Big[u_h(P_i)\frac{x_{1,P_k}-x_{1,P_j}}{2} \\
& +u_h(P_j)\frac{x_{1,P_i}-x_{1,P_k}}{2}+u_h(P_k)\frac{x_{1,P_j}-x_{1,P_i}}{2}\Big],
\end{aligned}
$$

其中 S_K 代表单元 K 的面积. 又注意到:

$$
\begin{aligned}
x_{2,M_j}-x_{2,M_k} &= \frac{1}{2}(x_{2,P_k}+x_{2,P_i})-\frac{1}{2}(x_{2,P_j}+x_{2,P_i}) \\
&= \frac{1}{2}(x_{2,P_k}-x_{2,P_j}),\\
x_{1,M_k}-x_{1,M_j} &= \frac{1}{2}(x_{1,P_j}+x_{1,P_i})-\frac{1}{2}(x_{1,P_k}+x_{1,P_i}) \\
&= \frac{1}{2}(x_{1,P_j}-x_{1,P_k}).
\end{aligned}
$$

这样一来, 由 (3.22) 可得

$$
I_K(u_h^{(1)},\Pi_h u_h^{(2)}) = \left(\frac{\partial u_h^{(1)}}{\partial x_1}\frac{\partial u_h^{(2)}}{\partial x_1}+\frac{\partial u_h^{(1)}}{\partial x_2}\frac{\partial u_h^{(2)}}{\partial x_2}\right)\cdot S_K. \tag{3.23}
$$

最后，由于

$$
\begin{aligned}
a(u_h,\Pi_h^*u_h) &= \sum_{P_i\in\Omega_h} u_h(P_i)\int_{\partial K_{P_i}^*}\frac{\partial u_h}{\partial\nu}\mathrm{d}s\\
&= \sum_{K\in\Omega_h} I_K(u_h,\Pi_h^*u_h)\\
&= \sum_{K\in\Omega_h}\left[\left(\frac{\partial u_h}{\partial x_1}\right)^2+\left(\frac{\partial u_h}{\partial x_2}\right)^2\right]\cdot S_K = |u_h|_1^2,
\end{aligned}
$$

并因 $U_h\subset H_0^1(\Omega)$ 中函数 u_h 满足 Poincare 不等式，$\|u_h\|_0\le\alpha|u_h|_1$(α 是一与 u_h 无关的常数)，所以存在常数 $\gamma>0$ 使得

$$
a(u_h,\Pi_h^*u_h)\ge\gamma\|u\|_1^2,\ \forall u_h\in U_h.
$$

引理 3.2 若 $u\in H^2(\Omega)\cap H_0^1(\Omega)$，则

$$
a(u-\Pi_hu,\Pi_h^*u_h)\le Ch\|u\|_2\cdot|u_h|_1,\ \forall u_h\in U_h. \tag{3.24}
$$

证明 由 (3.15) 可知

$$
\begin{aligned}
a(u-\Pi_hu,\Pi_h^*u_h) &= \sum_{P_i\in\Omega_h} u_h(P_i)\int_{\partial K_{P_i}^*}\frac{\partial(u-\Pi_hu)}{\partial\nu}\mathrm{d}s\\
&= \sum_{K\in\Omega_h}\left\{(u_h(P_j)-u_h(P_i))\int_{\overline{M_kQ}}\frac{\partial(u-\Pi_hu)}{\partial\nu}\mathrm{d}s+\right.\\
&\qquad (u_h(P_k)-u_h(P_j))\int_{\overline{M_iQ}}\frac{\partial(u-\Pi_hu)}{\partial\nu}\mathrm{d}s+\\
&\qquad \left.(u_h(P_i)-u_h(P_k))\int_{\overline{M_jQ}}\frac{\partial(u-\Pi_hu)}{\partial\nu}\mathrm{d}s\right\}.
\end{aligned} \tag{3.25}
$$

因 $u_h(x_1,x_2)$ 是 $K(P_i,P_j,P_k)$ 上的线性函数，于是

$$
u_h(P_j)-u_h(P_i)=\frac{\partial u_h}{\partial x_1}(x_{1,P_j}-x_{1,P_i})+\frac{\partial u_h}{\partial x_2}(x_{2,P_j}-x_{2,P_i}),
$$

其中 $\frac{\partial u_h}{\partial x_1}$ 和 $\frac{\partial u_h}{\partial x_2}$ 在 K 上为常数，从而有

$$
|u_h(P_j)-u_h(P_i)|\le h\left(\left|\frac{\partial u_h}{\partial x_1}\right|+\left|\frac{\partial u_h}{\partial x_2}\right|\right)\le C|u_h|_{1,K}. \tag{3.26}
$$

另外，由子空间 U_h 及插值投影 $\Pi_h u$ 的逼近性质，可证

$$
\begin{aligned}
&\left|\int_{\overline{M_kQ}} \frac{\partial(u-\Pi_h u)}{\partial \nu}\mathrm{d}s\right| \\
\le& \int_{\overline{M_kQ}}\left(\left|\frac{\partial(u-\Pi_h u)}{\partial x_1}\right| + \left|\frac{\partial(u-\Pi_h u)}{\partial x_2}\right|\right)\mathrm{d}s \\
\le& Ch^{\frac{1}{2}}\left\{\int_{\overline{M_kQ}}\left(\left|\frac{\partial(u-\Pi_h u)}{\partial x_1}\right|^2 + \left|\frac{\partial(u-\Pi_h u)}{\partial x_2}\right|^2\right)\mathrm{d}s\right\}^{\frac{1}{2}} \\
\le& Ch\|u\|_{2,K}.
\end{aligned}
\tag{3.27}
$$

由 (3.26) 和 (3.27), 得到

$$
\left|\big(u_h(P_j)-u_h(P_i)\big)\int_{\overline{M_kQ}}\frac{\partial(u-\Pi_h u)}{\partial \nu}\mathrm{d}s\right| \le Ch\|u\|_{2,K}|u_h|_{1,K}.
$$

对于表示式 (3.25) 右端中的其余两项, 也可得到同样的估计式. 这样一来, 由 Cauchy 不等式，有

$$
\begin{aligned}
|a(u-\Pi_h u,\Pi_h^* u_h)| &\le Ch\sum_{K\in\Omega_h}\|u\|_{2,K}\cdot|u_h|_{1,K} \\
&\le Ch\|u\|_2\cdot|u_h|_1.
\end{aligned}
$$

设 $u\in H_0^1(\Omega)$, 类似于 Galerkin 有限元法，函数 u 的椭圆投影定义为如此 $R_h u\in U_h$, 使得

$$
a(u-R_h u, v_h)=0,\ \forall v_h\in V_h. \tag{3.28}
$$

根据 $a(\cdot,\Pi_h^*\cdot)$ 的正定性 (引理 3.1) 和 Lax-Milgram 定理, $R_h u$ 可由方程 (3.28) 惟一确定.

引理 3.3 设 $u\in H^2(\Omega)\cap H_0^1(\Omega)$, $R_h u\in U_h$ 由 (3.28) 所定义，则有

$$
\|R_h u-u\|_1\le Ch\|u\|_2. \tag{3.29}
$$

证明 首先，由插值投影 $\Pi_h u$ 的逼近性质知

$$
\|\Pi_h u-u\|_1\le Ch\|u\|_2. \tag{3.30}
$$

再由引理 3.1 和 (3.28) 并利用引理 3.2, 有

$$
\begin{aligned}
\gamma\|R_h u-\Pi_h u\|_1^2 &\le a\big(R_h u-\Pi_h u,\Pi_h^*(R_h u-\Pi_h u)\big) \\
&= a\big(u-\Pi_h u,\Pi_h^*(R_h u-\Pi_h u)\big) \\
&\le Ch\|u\|_2\|R_h u-\Pi_h u\|_1.
\end{aligned}
\tag{3.31}
$$

由此，可知

$$\|R_h u - \Pi_h u\|_1 \le Ch\|u\|_2. \tag{3.32}$$

最后，引理的估计式 (3.29) 可由 (3.30) 和 (3.32) 通过三角不等式推出.

注 当 $u \in W^{3,p}(\Omega)$, $p > 1$ 时，在某些特定情形，尚可证明如下按 L^2- 范数的估计

$$\|R_h u - u\| \le Ch^2\|u\|_{W^{3,p}(\Omega)},\ p > 1. \tag{3.33}$$

(见 [17], 第三章， §6).

引理 3.4 对任意 $u_h^{(1)}, u_h^{(2)} \in U_h$,

$$(u_h^{(1)}, \Pi_h^* u_h^{(2)}) = (u_h^{(2)}, \Pi_h^* u_h^{(1)}); \tag{3.34}$$

另外，若令 $|||u_h||| = (u_h, \Pi_h^* u_h)^{\frac{1}{2}}$, 则存在正常数 C_1 和 C_2 使得

$$C_1\|u_h\| \le |||u_h||| \le C_2\|u_h\|,\ \forall u_h \in U_h. \tag{3.35}$$

证明 仍用 $K(P_i, P_j, P_k)$ 表示 Ω_h 中任意单元，$(\cdot,\cdot)_K$ 为区域 K 上的内积. 利用空间 U_h 和 V_h 的基函数，有

$$\begin{aligned}
&(u_h^{(1)}, \Pi_h^* u_h^{(2)})_K \\
&= \left(\sum_{l=i,j,k} u_h^{(1)}(P_l)\phi_l(x), \sum_{m=i,j,k} u_h^{(2)}(P_m)\phi_m^*(x)\right) \\
&= \sum_{l,m=i,j,k} (\phi_l, \phi_m^*)_K u_h^{(1)}(P_l) u_h^{(2)}(P_m).
\end{aligned} \tag{3.36}$$

由计算求出：$g_{l,m} = (\phi_l, \phi_m^*) = 7S_K/108$, 当 $l \ne m$, $g_{l,l} = 22S_K/108$, 这表明 (3.36) 是一个正定、对称的二次型. 又因

$$(u_h^{(1)}, \Pi_h^* u_h^{(2)}) = \sum_{K\in\Omega_h} (u_h^{(1)}, \Pi_h^* u_h^{(2)})_K.$$

由此即可推断引理的结论是成立的.

现在来讨论对流 - 扩散问题 (3.2) 的广义差分近似 (3.13) 的收敛性和误差估计，设 u 和 u_h 分别为问题 (3.2) 和半离散问题 (3.13) 的解. 类似地将误差 $u_h - u$ 分解成两部分：$u_h - u = \theta_h + \eta$, 其中 $\theta_h = u_h - R_h u$ 和 $\eta = R_h u - u$. 因 u 满足原方程 (3.2), 并由 $R_h u$ 的定义，有

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial R_h u}{\partial t}, v_h\right) + a(R_h u, v_h) \\
&= b(u, v_h) + \left(\frac{\partial (R_h u - u)}{\partial t}, v_h\right),\ \forall v_h \in V_h.
\end{aligned} \tag{3.37}$$

由 (3.13) 和 (3.37) 相减，可知 $\theta_h \in U_h$ 满足

$$\begin{aligned}&\left(\frac{\partial \theta_h}{\partial t}, v_h\right) + a(\theta_h, v_h)\\ &= b(u_h - u, v_h) - \left(\frac{\partial \eta}{\partial t}, v_h\right), \ \forall v_h \in V_h.\end{aligned} \tag{3.38}$$

在上式中取 $v_h = \Pi_h^* \theta_h$，由引理 3.1 和引理 3.4 可得

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|||\theta_h|||^2 + \gamma\|\theta_h\|_1^2\\ &\le |b(u_h - u, \Pi_h^*\theta_h)| + \left\|\frac{\partial \eta}{\partial t}\right\| \cdot \|\Pi_h^*\theta_h\|.\end{aligned} \tag{3.39}$$

这里，

$$\begin{aligned}&b(u_h - u, \Pi_h^*\theta_h)\\ &= \sum_{K\in\Omega_h}\left\{(\theta_h(P_j) - \theta_h(P_i))\int_{\overline{M_kQ}} \underline{b}\cdot\underline{\nu}(u_h - u)\mathrm{d}s\right.\\ &\quad + (\theta_h(P_k) - \theta_h(P_j))\int_{\overline{M_iQ}} \underline{b}\cdot\underline{\nu}(u_h - u)\mathrm{d}s\\ &\quad \left.+ (\theta_h(P_i) - \theta_h(P_k))\int_{\overline{M_jQ}} \underline{b}\cdot\underline{\nu}(u_h - u)\mathrm{d}s\right\},\end{aligned} \tag{3.40}$$

我们需要估计此式右端各项．首先，对 (3.40) 右端中的积分有

$$\begin{aligned}&\left|\int_{\overline{M_lQ}} \underline{b}\cdot\underline{\nu}(u_h - u)\mathrm{d}s\right|\\ &\le |b|\int_{\overline{M_lQ}}(|\eta| + |\theta_h|)\mathrm{d}s\\ &\le Ch^{\frac{1}{2}}\left(\int_{\overline{M_lQ}}(|\theta_h|^2 + |\eta|^2)\mathrm{d}s\right)^{\frac{1}{2}}\\ &\le C_1\|\theta_h\|_{0,K} + C_2h^{\frac{1}{2}}\left(\int_{\overline{M_lQ}}|\eta|^2\mathrm{d}s\right)^{\frac{1}{2}},\\ &\quad l = i, j, k.\end{aligned} \tag{3.41}$$

由 (3.41)、(3.26) 和 Cauchy 不等式可得

$$|b(u_h - u, \Pi_h^*\theta_h)| \le C_1\|\theta_h\|_1\|\theta_h\| + C_2\|\theta_h\|_1 R(\eta)h^{\frac{1}{2}}, \tag{3.42}$$

其中

$$R(\eta) = \sum_{K\in\Omega_h}\sum_{l=i,j,k}\left(\int_{\overline{M_lQ}}|\eta|^2\mathrm{d}s\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{3.43}$$

另外，若记 $\|\theta_h\|_h = \|\Pi_h^*\theta_h\| = \sum\limits_{P_i\in\Omega_h} \theta_h^2(P_i)S_{K_{P_i}^*}$，不难证明：在分片线性函数空间 U_h 上，范数 $\|\cdot\|_h$ 是与 $\|\cdot\|$ 等价的，从而与 $|||\cdot|||$ 也等价．由 (3.39) 和 (3.42)，并利用不等式：$a\cdot b \le \varepsilon a^2 + \frac{1}{4\epsilon}b^2(\varepsilon > 0)$，可以得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|||\theta_h|||^2 \le C_1|||\theta_h|||^2 + C_2\left(\left\|\frac{\partial\eta}{\partial t}\right\|^2 + hR^2(\eta)\right).$$

上式对 t 积分之后，则有

$$\begin{aligned}|||\theta_h(t)|||^2 \le\ & |||\theta_h(0)|||^2 + C_2\int_0^t\left(\left\|\frac{\partial\eta}{\partial t}(\tau)\right\|^2 + hR^2(\eta(\tau))\right)\mathrm{d}\tau\\ &+C_1\int_0^t |||\theta_h(\tau)|||^2\mathrm{d}\tau,\end{aligned}$$

再利用 Gronwall 不等式，由此推知：当 $0\le t\le T$ 时，

$$\|\theta_h(t)\|^2 \le C(T)\left\{\|\theta_h(0)\|^2 + \int_0^t\left(\left\|\frac{\partial\eta}{\partial t}(\tau)\right\|^2 + hR^2(\eta(\tau))\right)\mathrm{d}\tau\right\}.$$

又因 $\|u_h(t)-u(t)\| \le \|\theta_h(t)\| + \|\eta(t)\|$ 和

$$\|\eta(t)\| \le \|\eta(0)\| + \int_0^t\left\|\frac{\partial\eta}{\partial t}(\tau)\right\|\mathrm{d}\tau,$$

最后可推导出

$$\begin{aligned}\|u_h(t)-u(t)\|^2 \le\ & C(T)\left\{\|u_h^0-u^0\|^2 + \|\eta(0)\|^2\right.\\ &\left.+\int_0^t\left(\left\|\frac{\partial\eta}{\partial t}(\tau)\right\|^2 + hR^2(\eta(\tau))\right)\mathrm{d}\tau\right\},\ 0\le t\le T.\end{aligned}\tag{3.44}$$

由此看到，如果当 $h\to 0$ 时，

$$\|\eta\|、\left\|\frac{\partial\eta}{\partial t}\right\|\text{和}hR^2(\eta)\to 0,\ \text{关于}t\in[0,T]\text{一致}$$

且 $\|u_h^0-u^0\|\to 0$(当 $h\to 0$)，那么 $u_h(t)$ 必定按 L^2- 范数收敛到 (3.2) 的解 $u(t)$，并且误差 $u_h(t)-u(t)$ 可通过初始值的误差和真解与其椭圆投影之间的误差来进行估计．

§3.3 特征有限元法

基于对流占优扩散问题具有双曲方程的特点，而存在特征方向 (线) 是双曲方程的重要特性．因此，在双曲方程和对流占优扩散方程的数值解法研究中，有许多

工作致力于将普通的差分方法、有限元方法与特征线法结合起来 (见 [20]、[22]). 本节介绍特征线法和有限元方法的结合.

仍以 §2.2 中的线性对流 - 扩散问题为例

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t}+b_1\dfrac{\partial u}{\partial x_1}+b_2\dfrac{\partial u}{\partial x_2}-\mu\Delta u=f, \quad x\in\Omega\subset\mathbb{R}^2, \\ \qquad b_1,b_2\text{为常数}, \quad 0<\mu<<(b_1^2+b_2^2)^{\frac12}, \\ u=0, \quad x\in\partial\Omega. \end{cases} \tag{3.45}$$

在空间 (x_1,x_2,t), 由

$$\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t}=b_1\,, \quad \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t}=b_2\,, \quad t>0, \tag{3.46}$$

所确定的曲线族: $x_1(t)=x_1(0)+b_1t$, $x_2(t)=x_2(0)+b_2t$ 称为方程 (3.45) 的特征线 (严格讲应属于 $\mu=0$ 的方程). 令 $\psi=\left(1+b_1^2+b_2^2\right)^{1/2}$, 则 $\underline{\tau}=(\frac{1}{\psi},\frac{b_1}{\psi},\frac{b_2}{\psi})$ 代表特征方向的单位向量, 并有 $\dfrac{\partial}{\partial\tau}=\dfrac{1}{\psi}\dfrac{\partial}{\partial t}+\dfrac{b_1}{\psi}\dfrac{\partial}{\partial x_1}+\dfrac{b_2}{\psi}\dfrac{\partial}{\partial x_2}$. 借助特征方向, 可将方程 (3.45) 改写为

$$\psi\frac{\partial u}{\partial\tau}-\mu\Delta u=f, \qquad x\in\Omega,\ t>0\,. \tag{3.47}$$

首先, 构造方程 (3.47) 的关于时间变量的差分逼近. 令 $\Delta t>0$ 为时间步长, 记 $t_n=n\Delta t$, $n=0,1,\cdots$. 由 (3.46) 知, $t=t_n$ 时刻从 $x=(x_1,x_2)$ 点始发的特征线在空间 (t,x_1,x_2) 与平面 $t=t_{n-1}$ 的交点为

$$\overline{x}=(x_1-b_1\Delta t,\ x_2-b_2\Delta t):=(\overline{x}_1,\ \overline{x}_2)\,. \tag{3.48}$$

因此, 这里用如下近似公式逼近沿特征方向的导数

$$\psi\frac{\partial u}{\partial\tau}\approx\psi\frac{u(x,t)-u(\overline{x},t-\Delta t)}{((\Delta t)^2+|x-\overline{x}|^2)^{1/2}}=\frac{u(x,t)-u(\overline{x},t-\Delta t)}{\Delta t}. \tag{3.49}$$

记 $u(x,t_n)=u^n(x)$, 由此可建立方程 (3.45) 的下述 (时间离散化) 近似方程

$$\frac{u^n(x)-u^{n-1}(\overline{x})}{\Delta t}-\mu\Delta u^n(x)=f(x,t_n)\,. \tag{3.50}$$

下一步要作的事情是, 采用 Galerkin 有限元法, 将 (3.50) 关于空间变量 x 进一步离散化. 设 $\left\{J_h,0<h<h_0\right\}$ 为区域 Ω 的正则剖分族, $S_h\subset H_0^1(\Omega)$ 是基于剖分 J_h 和分片多项式插值构造的有限元函数空间, 并假定 S_h 满足条件: 对某一整数 $r\geq 2$,

$$\begin{gathered}\inf_{v_h\in S_h}\left\{\|v-v_h\|+h\|v-v_h\|_1\right\}\leq Ch^s\|v\|_s, \\ \forall\, 1\leq s\leq r, \quad v\in H^s(\Omega)\cap H_0^1(\Omega).\end{gathered} \tag{3.51}$$

利用方程 (3.50) 的变分 (弱) 形式和子空间 S_h, 求解对流 - 扩散方程 (3.45) 的特征有限元法定义为：求函数 $u_h^n(x)\in S_h$, $n=0,1,\cdots$, 使得

$$\left(\frac{u_h^n(x)-u_h^{n-1}(\overline{x})}{\Delta t},v_h\right)+\mu\big(\nabla u_h^n(x),\nabla v_h\big)=\big(f(x,t_n),v_h\big),\quad \forall v_h\in S_h,\quad n=1,2,\cdots,\tag{3.52}$$

$$\big(u_h^0(x),v_h\big)=\big(u^0(x),v_h\big),\quad \forall v_h\in S_h.\tag{3.53}$$

显然方程 (3.45) 当 $\mu>0$ 时也是一个二阶线性抛物方程，因此可以构造它的向后 Euler-Galerkin 全离散计算格式 (见第二章 §2.1), 此格式与格式 (3.52) 相对于连续方程 (3.45) 的逼近误差阶基本上是一致的. 自然地人们要问，特征有限元格式的优越性何在？这里主要针对“对流占优”的扩散问题来回答这一问题. 这类问题的解 $u(x,t)$ 往往存在“瞬变层”或“边界层”，并且解 u 沿特征方向 τ 的导数值如 $\dfrac{\partial^2 u}{\partial\tau^2}$ 远比沿 t 方向的导数值 $\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ 小，所以沿特征方向作差分逼近引起的实际误差要比沿 t 方向差分逼近的误差要小得多，因而特征有限元格式用于求解这类问题时能够提高近似解的精度. 其次，类似于特征差分格式，特征有限元格式比普通的 Euler-Galerkin 格式具有更好的稳定性质 (特定情形格式满足极值原理). 基于以上理由，对于“对流占优”扩散问题，特征有限元格式可作为首选格式.

关于格式 (3.52) 、(3.53) 的求解计算，可按时间层 ($n=1,2,\cdots$) 依次求解，每次需解一个线性代数方程组，与抛物问题的隐型全离散格式的求解计算基本上一致，但有一点是不同的：由于 $\overline{x}$ 不一定是区域 Ω 中的剖分节点，所以对于方程 (3.52) 中 $u_h^{n-1}(\overline{x})$ 的计算，需要利用 $u_h^{n-1}(x)$ 在 $\overline{x}$ 点附近若干节点上的值用插值的方法给出，记为 $u_h^{n-1}(\overline{x})=I_h u_h^{n-1}(x)$.

下面讨论特征有限元法的收敛性和误差估计. 如下引理对于特征有限元格式的理论分析是很有用的.

引理 3.5 设 $w\in L^2(\Omega)$, $\overline{w}(x)=w(x-g(x)\Delta t)$, 其中 g, g' 在 $\overline{\Omega}$ 上有界，则当 $\Delta t>0$ 充分小时，成立

$$\|w-\overline{w}\|_{H^{-1}}\le K_0\|w\|_{L^2}\Delta t,\tag{3.54}$$

其中常数 K_0 仅与 $\|g\|_{L^\infty}$ 和 $\|g'\|_{L^\infty}$ 有关，而范数 $\|\cdot\|_{H^{-1}}$ 则由下式定义

$$\|v\|_{H^{-1}}=\sup_{0\ne\phi\in H^1}\frac{(v,\phi)}{\|\phi\|_{H^1}}.\tag{3.55}$$

定理 3.1 设 $u=u(x,t)$ 是问题 (3.45) 的惟一解，并假定 $u\in L^\infty(0,T;H^q)$, $u_t\in L^2(0,T;H^q)$, $2<q\le r$ 和 $u_{\tau\tau}\in L^2((0,T)\times\Omega)$. 则特征有限元格式 (3.52) 、

(3.53) 的解 $\{u_h^n\}$ 满足如下误差估计式

$$\max_{0\le n\le T/\Delta t}\|u_h^n(x)-u(x,t_n)\|\le C_1\Delta t\left\|\frac{\partial^2 u}{\partial\tau^2}\right\|_{L^2((0,T)\times\Omega)} +C_2h^q\left\{\|u\|_{L^\infty(0,T;H^q)}+\left\|\frac{\partial u}{\partial t}\right\|_{L^2(0,T;H^q)}\right\}. \tag{3.56}$$

证明 引进解 $u(\cdot,t)$ 的椭圆投影 $P_1u(\cdot,t)\in S_h$, 它由下式定义:

$$\big(\nabla P_1u,\nabla v_h\big)=\big(\nabla u,\nabla v_h\big),\quad \forall v_h\in S_h,$$

对任一固定 $t\in[0,T]$.

仿照第一章 §1.3 的作法, 将误差 $(u_h^n-u^n)(x)$ 分为两部分: $(u_h^n-u^n)(x)=\theta^n(x)+\eta^n(x)$, 其中

$$\theta^n(x)=(u_h^n-P_1u^n)(x),\quad \eta^n(x)=(P_1u^n-u^n)(x).$$

$u^n(x)=u(x,t_n)$. 由第一章引理 1.1, $\eta^n(x)$ 满足如下估计式: 对于 $0\le n\Delta t\le T$,

$$\|\eta^n\|_s\le Ch^{q-s}\|u\|_{L^\infty(0,T;H^q)},\quad -1\le s\le 1, \tag{3.57}$$

并且 $\eta=P_1u-u$ 关于 t 的导数 η_t 也满足

$$\|\eta_t^n\|_s\le Ch^{q-s}\|u_t\|_{L^\infty(0,T;H^q)},\quad -1\le s\le 1. \tag{3.58}$$

这里, $s=-1$ 情形, 以上估计属于负模估计, $\|\cdot\|_{-1}$ 即前面已定义的范数 $\|\cdot\|_{H^{-1}}$.

需要进一步估计 $\theta^n(x)$. 为此, 利用 (3.52) 和取 $v_h=\theta^n\in S_h$, 得到

$$\begin{aligned}&\left(\frac{\theta^n(x)-\theta^{n-1}(\bar{x})}{\Delta t},\theta^n(x)\right)+\mu\left(\nabla\theta^n(x),\nabla\theta^n(x)\right)\\ &\quad=\left(\psi\left(\frac{\partial u}{\partial\tau}\right)^n-\frac{u^n(x)-u^{n-1}(\bar{x})}{\Delta t},\theta^n(x)\right)\\ &\qquad+\left(\frac{\eta^n(x)-\eta^{n-1}(\bar{x})}{\Delta t},\theta^n(x)\right)-(\eta^n(x),\theta^n(x)).\end{aligned} \tag{3.59}$$

利用 Taylor 展开式和引理 3.5 中的不等式, 经过类似于第一章 §1.3 的一系列估算, 从上面等式可以得到如下估计式

$$\max_{0\le n\Delta t\le T}\|\theta^n\|\le C\Big\{\|\theta^0\|+\max_{0\le n\Delta t\le T}\|\eta^n\| +\left\|\frac{\partial\eta}{\partial t}\right\|_{L^2(0,T;H^{-1})}+\Delta t\left\|\frac{\partial^2u}{\partial\tau^2}\right\|_{L^2((0,T)\times\Omega)}\Big\}. \tag{3.60}$$

由 (3.51) 和 (3.57) 知

$$\begin{aligned}\|\theta^0\| &= \|u_h^0 - P_1 u^0\| \\ &\le \|u_h^0 - u^0\| + \|u^0 - P_1 u^0\| \\ &\le Ch^q \|u^0\|_q.\end{aligned} \tag{3.61}$$

综合估计式 (3.57)~(3.61) 并利用三角不等式即可证定理的估计式 (3.56).

§3.4 一类抛物 - 椭圆耦合方程组: 多孔介质中两相可混溶驱动问题

由不同类型偏微分方程按适当方式耦合一起构成的耦合方程组，在科学中是屡见不鲜的. 例如，声热耦合问题中的双曲 - 抛物方程组，以及出现在自然对流问题、半导体瞬态问题、多孔介质中两相可混溶驱动等问题中的抛物 - 椭圆耦合方程组. 本节，通过一个油藏数值模拟的例子，介绍抛物 - 椭圆耦合方程组的数值解法.

在多孔介质中，一不可压缩流体被另一流体混溶、驱动的过程，在忽略重力影响的情形，可用如下数学模型描述:

$$-\mathrm{div}(a(c)\nabla p) = q(x,t), \qquad x\in\Omega,\ t>0, \tag{3.62}$$

$$\phi\frac{\partial c}{\partial t} - \mathrm{div}(D\nabla c) + \underline{u}\cdot\nabla c = \tilde{c}\, q(x,t), \tag{3.63}$$

$$D\nabla c\cdot\underline{\nu} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial\nu} = 0, \qquad x\in\partial\Omega,\ t>0, \tag{3.64}$$

$$c(x,0) = c^0(x), \qquad x\in\Omega, \tag{3.65}$$

其中 $\Omega\subset\mathbb{R}^d(d=2$ 或 $3)$ 代表油藏占据的空间区域，假定 Ω 为有界单连通区域且其边界 $\partial\Omega$ 充分光滑. 函数 $p(x,t)$ 为混合流体内的压力，$\underline{u}=-a(c)\nabla p$ 是混合流体的 Darcy 速度，$a(c)=k/\mu$, $k=k(x)$ 为多孔介质的渗透率，$\mu=\mu(c)$ 为流体的黏性系数，$\phi(x)$ 为介质的孔隙系数，$c(x,t)$ 为驱油溶剂在油藏内的浓度，D 为扩散系数 (矩阵). 这里假定 D 与 $\underline{u}$ 无关并且 $D=d(x)I\ge d_0I$, $d_0>0$, $q(x,t)$ 代表源 (或汇) 的强度，$\tilde{c}(x,t)$ 是某一给定函数.

这里，还假定

$$0<a_*\le a(x,c)\le a^*, \quad 0<\phi_*\le\phi(x)\le\phi^*, \tag{3.66}$$

其中 a_*, a^*, ϕ_*, ϕ^* 为正常数. 据此，方程 (3.62) 和 (3.63) 分别属于椭圆型和抛物型方程，所以 (3.62)~(3.65) 是一个抛物 - 椭圆耦合方程组，并且是一个非线性问题. 习常称 (3.62) 为压力方程，(3.63) 则称为浓度方程.

下面，介绍初边值问题 (3.62)~(3.65) 的一类有限元近似. 首先从问题的变分陈述开始.

引进函数空间：

$$H(\mathrm{div},\Omega)=\{\underline{u}:\ \underline{u},\ \mathrm{div}\underline{u}\ 属于L^2(\Omega)\};$$

$$H=\{\underline{u}\in H(\mathrm{div},\Omega):\ \underline{u}\cdot\underline{\nu}=0,\ x\in\partial\Omega\};$$

$$L=L^2(\Omega)/\{p:\ p在\Omega上恒等于一个常数\};$$

$$M=H^1(\Omega).$$

记 $\underline{u}=a(c)\bigtriangledown p$，并记

$$A_1(c;\underline{u},\ \underline{v})=\left(\frac{1}{a(c)}\,\underline{u},\ \underline{v}\right),$$

$$B(\underline{u},\ \lambda)=(\mathrm{div}\underline{u},\ \lambda),$$

$$A_2(D;\ c,\ \phi)=(D\bigtriangledown c,\ \bigtriangledown\phi).$$

在辅助方程 $\frac{1}{a(c)}\ \underline{u}=\bigtriangledown p$ 两端乘以 $\underline{v}\in H$ 并在 Ω 上积分，同时分别地用 $\lambda\in L$ 和 $\phi\in M$ 与方程 (3.62) 和 (3.63) 作内积乘，再利用分部积分公式，便可得出问题 (3.62)~(3.65) 的变分形式如下：求 $(\underline{u},p,c)\in H\times L\times M$，满足

$$A_1(c;\underline{u},\underline{v})+B(\underline{v},p)=0, \tag{3.67}$$

$$B(\underline{u},\lambda)+(q,\lambda)=0, \tag{3.68}$$

$$\left(\phi\frac{\partial c}{\partial t},\ \psi\right)+A_2(D;\ c,\ \psi)+(\underline{u}\cdot\bigtriangledown c,\ \psi)$$
$$=(\tilde{c}q,\ \psi),\quad t>0, \tag{3.69}$$

$$\forall(\underline{v},\ \lambda,\ \psi)\in H\times L\times M,$$

$$c(x,\ 0)=c^0(x),\quad x\in\Omega. \tag{3.70}$$

值得提醒一下，(3.67) 和 (3.68) 是压力方程 (3.62) 的变分方程，于此将 p 和 $\underline{u}=a(c)\bigtriangledown p$ 都当作未知函数，从这一点看是与标准 Galerkin 有限元的作法不同的，相应的压力方程的有限元近似称为 " 混合有限元法 ", 它的一个重要优点是可以同时求出压力分布以及它的梯度. 对于当前问题而言，因为 $\underline{u}=a(c)\bigtriangledown p$(压力梯度) 出现在浓度方程 (3.63) 中，关于压力方程的离散近似采用 “混合有限元法 ” 是非常适宜的.

进一步的问题，是建立函数空间 H, L 和 M 的有限元近似空间：H_h, L_h 和 M_h. 先介绍 H_h 和 L_h 的选取. 当函数 c 为已知时，(3.62) 是熟悉的二阶椭圆方程，其

变分 (混合型) 形式为

$$\left\{\begin{aligned} &A_1(c;\ \underline{u},\ \underline{v})+B(\underline{v},\ p)=0,\\ &B(\underline{u},\ \lambda)+(q,\ \lambda)=0.\end{aligned}\right. \qquad \forall(\underline{v},\ \lambda)\in H\times L \tag{3.71}$$

这属于一个鞍点问题. 设 $\Omega_{h_p}=\{K_p\}$ 是区域 Ω 的一个正则剖分. Raviart 和 Thomas ([21]) 关于变分问题 (3.71) 曾经借助参考单元, 用巧妙的方法构造出一类有限元空间对 $(H_{h_p},\ L_{h_p})$, 后来被广泛应用并誉为 "Raviart-Thomas 空间". 对于指数为 m 的 R-T 空间 $(H_{h_p},\ L_{h_p})$ 具有逼近性质:

$$\inf_{\underline{v}_h\in H_{h_p}}\|\underline{v}-\underline{v}_h\|_{H(\mathrm{div},\Omega)}\le C\ h_p^{m+1}\|\underline{v}\|_{H^{m+1}(\Omega)}\ , \tag{3.72}$$

$$\inf_{\lambda_h\in L_{h_p}}\|\lambda-\lambda_h\|\le C\ h_p^{m+1}\|\lambda\|_{H^{m+1}(\Omega)}\ . \tag{3.73}$$

详细介绍 T-R 空间的构造需要一定的篇幅, 请读者参看文章 [21]. 关于空间 M_h, 可以采用在剖分 Ω_{h_c} 上普通的由分片 m 次多项式组成的有限元空间即可.

基于取定的近似空间 $(H_{h_p},\ L_{h_p},\ M_{h_c})$, 问题 (3.62)~(3.65) 的有限元近似为: 求 $(\underline{u}_{h_p}(\cdot,\ t),\ p_{h_p}(\cdot,\ t),\ c_{h_c}(\cdot,\ t))\in H_{h_p}\times L_{h_p}\times M_{h_c}$, 满足

$$A_1(c_{h_c};\ \underline{u}_{h_p},\ \underline{v}_{h_p})+B(\underline{v}_{h_p},\ p_{h_p})=0\,, \tag{3.74}$$

$$B(\underline{u}_{h_p},\ \lambda_{h_p})+(q,\lambda_{h_p})=0\,, \tag{3.75}$$

$$\begin{aligned}&\left(\phi\,\frac{\partial c_{h_c}}{\partial t},\ \psi_{h_c}\right)+A_2(D;\ c_{h_c},\ \psi_{h_c})\\ &+(\underline{u}_{h_p}\cdot\nabla c_{h_c},\ \psi_{h_c})=(\tilde{c}\,q,\ \psi_{h_c})\,,\end{aligned} \tag{3.76}$$

$$\forall\ (\underline{v}_{h_p},\ \lambda_{h_p},\ \psi_{h_c})\in H_{h_p}\times L_{h_P}\times M_{h_c}$$

$$c_{h_c}(x,0)=c_{h_c}^0(x)\in M_{h_c}\,. \tag{3.77}$$

进一步作时间变量的离散化. 为此, 仍用 $k>0$ 代表时间步长, 令 $t_n=nk$, $n=0,1,\cdots$, 并记 $u_{h_p}^n(\cdot)=u_{h_p}(\cdot,t_n)$. 注意到 (3.76) 属于对流 - 扩散方程, 因此这里采用 §2.3 中介绍的 "沿特征线差分逼近" 的方法将它离散化, 即用如下差分方程近似它:

$$\begin{aligned}&\left(\frac{c_{h_c}^n(x)-c_{h_c}^{n-1}(\overline{x})}{k},\psi_{h_c}\right)+A_2(D;c_{h_c}^n(x),\psi_{h_c})\\ &=((\tilde{c}q)^n,\psi_{h_c})\,,\quad \forall\psi_{h_c}\in M_h\,.\end{aligned} \tag{3.78}$$

其中 $\bar{x} = x - \underline{u}_{h_c}(x,t)k$ 可用近似公式：$\bar{x} = x - \underline{u}_{h_p}^n(x)k$ 代替．此外，压力方程 (3.74)、(3.75) 也可近似地写成：

$$A_1(c_{h_c}^{n-1};\ \underline{u}_{h_p}^n,\ \underline{v}_{h_p}) + B(\underline{v}_{h_p},\ p_h^n) = 0, \tag{3.79}$$

$$B(\underline{u}_{h_p}^n,\ \lambda_{h_p}) + (q^n,\ \lambda_{h_p}) = 0, \tag{3.80}$$

$$\forall\ (\underline{v}_{h_p}, \lambda_{h_p}) \in H_{h_p} \times L_{h_p}.$$

将 (3.79)、(3.80) 和 (3.78) 联合在一起，便得到求解问题 (3.62)~(3.65) 的一个全离散计算格式．求解的步骤是这样的：先由 (3.77) 得到浓度的初值 $c_{h_c}^0$，然后令 $n=1$，由求解 (3.79)、(3.80) 获得 $u_{h_p}^1, p_{h_p}^1$，进而由求解 (3.78) 得到 $c_{h_c}^1$．再令 $n = 2, 3, \cdots$，依次求解 (3.79)、(3.80) 和 (3.78) 即可计算出 $(u_{h_p}^n, p_{h_p}^n, c_{h_c}^n), n = 1, 2, \cdots$．

值得注意，上述全离散格式中的近似公式

$$\overline{x} = x - u_{h_p}^n(x)k := g_{k,h_p}^n(x), \quad x \in \Omega, \tag{3.81}$$

在 k 充分小时为从 Ω 到 Ω 的非线性映射，当 $u_{h_p}^n \in C^1(\overline{\Omega})$ 并且 $\max\limits_{\overline{\Omega}} |D_x u_{h_p}^n(x)|$ 关于 k, h_p 和 n 为一致有界的时候，则有 $\mathrm{d}\bar{x} = \mathrm{d}x + O(k)$．关于这一映射性质的讨论在特征有限元法的理论分析中是非常重要的 (参考 [20]、[22])．

注记：

1. 关于对流占优扩散问题，T. J. Hughes 和 A. Brooks[25] 提出过一种沿流线方向附加人工黏性的间断有限元法，称为 "Streamline-diffusion method"．后来，T. J. Hughes、C. Johnson、C. Sun 和他们的合作人，对于这类方法开展了一系列研究工作 (见 [25]~[27])，并应用于流体力学问题的计算．
2. 关于对流占优扩散方程和一阶双曲方程的迎风型数值方法的研究也是一直很活跃的，人们已从多种途径构造出各种各样的迎风型数值计算格式．除了传统的差分迎风格式外，还有近年来从有限元法 (标准与非标准) 出发构造出的迎风型数值计算格式 (见 [28],[29],[37],[38])．
3. 沿特征线作时间变量的离散化并与有限元 (或有限体积) 法结合，这是求解含线性或非线性对流项方程的有效、值得推荐的数值计算方法，已被成功地用于一些重要的应用问题 (参看 [23],[24])．

第四章 二阶波动方程和一阶双曲方程组的数值解法

二阶波动与一阶双曲方程 (组) 是用于描写振动现象和波在介质中传播过程的数学方程. 二阶波动方程出现在机械振动、声波、弹性波的理论中, 一阶双曲方程组可直接来源于流体、气体力学、电磁波理论, 也可由高阶波动方程转化而来. 上述两类方程在微分方程理论中均属于双曲型方程的范畴. 关于这两类方程的初值或初边值问题数值解法的研究一直是微分方程数值解方向和计算数学学科的重点课题之一, 有着十分广泛的应用. 本章 §4.1 介绍二阶线性波动方程 (组) 的初值与初边值问题. §4.2 介绍二阶线性波动方程的差分法和有限元方法. §4.3 介绍求解线性与非线性一阶双曲方程的一些重要差分格式. §4.4 介绍间断有限元方法及其对于中子输运问题和非线性双曲守恒方程的应用.

§4.1 声波与弹性波方程 (组)

本节介绍二阶波动方程的两个重要例子: 声波方程与弹性波方程组.

声波方程

由声振动在介质 (如气体和液体) 中激起的纵波 (声波) 可用下述二阶线性偏微分方程描述

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \Delta u = 0, \quad x \in \mathbb{R}^d, t > 0, \tag{4.1}$$

其中 $\Delta = \sum_{j=1}^{d} \partial^2/\partial x_j^2$ 为 Laplace 算子, u 表示介质沿传播方向的位移, $c > 0$ 为波速.

若用符号 $i\omega$ 和 $i\xi_j (i = \sqrt{-1})$ 分别地替代 (4.1) 中的微商算符$\partial/\partial t$ 和 $\partial/\partial x_j (1 \le j \le d)$, 可得: $\omega^2 - c^2|\xi|^2 = 0$, 其中 $|\xi|^2 = \xi_1^2 + \cdots + \xi_d^2$, 称此为 (4.1) 的符号方程. 空间 $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ 中超曲面

$$\{(x,t) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} : c^2(t - t_0)^2 = |x - x_0|^2\}$$

称为特征锥, 它在波动方程的理论研究中具有重要作用. 波动方程 (4.1) 的基本定解问题之一是 Cauchy (初值) 问题: 求方程 (4.1) 的满足如下初值条件的解

$$u(x,0) = u^0(x), \ \frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = v^0(x), \ x \in \mathbb{R}^d. \tag{4.2}$$

若令 $u_1 = u$ 和 $u_2 = \frac{\partial u}{\partial t}$, 则可将 (4.1)、(4.2) 化为下述等价方程组

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ c^2\Delta u & 0 \end{bmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = 0.$$

记

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ c^2\triangle & 0 \end{bmatrix},\ D(A) = H^2(\mathbb{R}^d) \times H^1(\mathbb{R}^d),$$

并对于 $(u_1, u_2) \in H^1(\mathbb{R}^d) \times L^2(\mathbb{R}^d)$ 定义能量范数

$$\|(u_1, u_2)\|_E = \left\{ \int_{\mathbb{R}^n} (|u_1|^2 + |\nabla u_1|^2 + |u_2|^2) \mathrm{d}x \right\}^{\frac{1}{2}}. \tag{4.3}$$

借助泛函分析中线性算子 C^0 群的理论, 可以证明

定理 4.1 *对任意给定 $u^0(x) \in H^2(\mathbb{R}^d)$ 和 $v^0(x) \in H^1(\mathbb{R}^d)$, 存在惟一函数 $u(x,t) \in C^1([0,\infty); H^2(\mathbb{R}^d))$ 满足 (4.1)、(4.2), 并有估计式*

$$\|(u, u_t)\|_E \le e^{2c|t|}\|(u^0, v^0)\|_E,\ \forall t \in \mathbb{R}. \tag{4.4}$$

注 事实上, 此定理是如下事实的推论, 即算子 A 生成空间 $H^1(\mathbb{R}^d)\times L^2(\mathbb{R}^d)$ 上的一个 C^0 群 $\{E(t),\ t \in \mathbb{R}\}$, 并有 $\|E(t)\| \le e^{2c|t|}$, $\forall t \in \mathbb{R}$. 若令 $(u_1, u_2) = E(t)(u^0, u^1)$, 则有

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = A\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_2 \\ c^2\triangle u_1 \end{pmatrix}.$$

弹性波方程组

用 $x = (x_1, x_2, x_3)$ 表示弹性介质占据空间区域 $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ 中点的位置坐标, $u(x,t) = (u_1(x,t), u_2(x,t), u_3(x,t))^\top$ 为 x 点于时刻 t 的位移向量, 则介质内的应变张量为

$$\epsilon = \{\varepsilon_{ij}\},\ \varepsilon_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}(i \ne j),$$

$$\varepsilon_{ii} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i},\ i, j = 1, 2, 3.$$

将上述应变 - 位移关系记为

$$\epsilon = B(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3})u,$$

其中 $\epsilon = (\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, \varepsilon_{12}, \varepsilon_{23}, \varepsilon_{31})^{\mathrm{T}}$, B 为关于 $\dfrac{\partial}{\partial x_i}$ 的 6×3 符号运算矩阵

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x_3} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x_3} & \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} & 0 & \frac{\partial}{\partial x_1} \end{bmatrix}.$$

其次，介质内的应力及其与应变的关系可表示为

$$\begin{aligned}\sigma &= (\sigma_{11},\sigma_{22},\sigma_{33},\sigma_{12},\sigma_{23},\sigma_{31})^{\mathrm{T}}\\ &= DB(\frac{\partial}{\partial x_1},\frac{\partial}{\partial x_2},\frac{\partial}{\partial x_3})u,\end{aligned}$$

其中 D 是表征介质弹性特征的 6×6 矩阵. 假定介质是各向同性时，则 $D=(d_{ij})$ 的元素满足：

$$d_{11}=d_{22}=d_{33}=\lambda+2\mu,\ d_{12}=d_{13}=d_{23}=\lambda,$$

$$d_{44}=d_{55}=d_{66}=\mu,\ \text{其余元素为零},$$

λ,μ 称为 Lame 常数.

这样一来，以位移为未知函数的弹性波方程组为

$$\rho(x)\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}= B^{\top}\left(\frac{\partial}{\partial x_1},\frac{\partial}{\partial x_2},\frac{\partial}{\partial x_3}\right)DB\left(\frac{\partial}{\partial x_1},\frac{\partial}{\partial x_2},\frac{\partial}{\partial x_3}\right)u-F(x,t)$$

或者改写后的二阶线性偏微分方程组

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}-\frac{1}{\rho(x)}\sum_{i,j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{ij}(x)\frac{\partial u}{\partial x_j}\right)=\frac{1}{\rho(x)}F(x,t), \tag{4.5}$$

其中 $\rho(x)$ 为介质的密度，当系数矩阵 $A(x)=\big(a_{ij}(x)\big)$ 为正定时，则 (4.5) 是一个以 $u_i(x,t)$, $i=1,2,3$ 为未知函数的二阶双曲方程组.

在限定区域 Ω 上求解二阶双曲方程 (组) 的问题属于初边值问题，此时除了形如 (4.2) 的初值条件外，尚需在区域 Ω 的边界 $\partial\Omega$ 上指定恰当的边值条件.

§4.2 二阶波动方程的数值解法

本节介绍二阶波动问题的数值解法，包括解 Cauchy 问题的差分法、有界区域上初边值问题的有限元近似和人工边界上的无反射近似边界条件.

Cauchy 问题 (4.1) 、 (4.2) 的差分逼近

不妨设求解区域 $\overline{G}=\big\{(x,t):x\in\mathbb{R}^d,\ t\ge 0\big\}$ 的剖分是规则的，时间步长记为 Δt, 空间变量 $x\in\mathbb{R}^d$ 各个坐标方向的步长相等，记为 h. 简记 $x_J=(j_1h,j_2h,\cdots,j_dh)$, $t_n=n\Delta t$, 则 $\overline{G}_{h,\Delta t}=\big\{(x_J,t_n):J=(j_1,j_2,\cdots,j_d)\in\mathbb{Z}^d,\ n=0,1,\cdots\big\}$ 代表 $\overline{G}$ 的剖分节点集合. 在 $\overline{G}_{h,\Delta t}$ 的内点 (x_J,t_n), $n>0$ 处以二阶中心

差商 $\frac{1}{\Delta t^2}\delta_t^2 u(x_J,t_n)$ 和 $\frac{1}{h^2}\delta_{x_l}^2 u(x_J,t_n)$ 分别地近似 (4.1) 中函数 u 关于自变量 t 和关于 x_l 的二阶偏微商，可得如下差分方程

$$\frac{1}{\Delta t^2}\delta_t^2 U_J^n - c^2\frac{1}{h^2}\sum_{l=1}^d \delta_{x_l}^2 U_J^n = 0.$$

由于 $\delta_t^2 U_J^n = U_J^{n+1} - 2U_J^n + U_J^{n-1}$, 上述方程可改写成

$$U_J^{n+1} = 2U_J^n + c^2 r^2 \sum_{l=1}^d \delta_{x_l}^2 U_J^n - U_J^{n-1},\ n = 1,2,\cdots, \tag{4.6}$$

其中 $r = \frac{\Delta t}{h}$ 为时间与空间步长之比. 这是关于 U^n 的一个三层递推公式，用它求解需要先给出初始两层即 U^0 和 U^1 的值，其中 $U^0 = \{U_J^0 : J \in \mathbb{Z}^d\}$ 可直接由初值条件 (4.2) 中的第一式给出，即

$$U_J^0 = u^0(x_J),\ J \in \mathbb{Z}^d. \tag{4.7}$$

为得到 $U^1 = \{U_J^1 : J \in \mathbb{Z}^d\}$ 的近似计算公式，先用下式近似 (4.2) 中的第二个初值条件

$$(2\Delta t)^{-1}(U_J^1 - U_J^{-1}) = \frac{\partial u}{\partial t}(x_J, 0) = v^0(x_J).$$

另设 (4.6) 对 $n = 0$ 成立，即

$$U_J^1 = 2U_J^0 + c^2 r^2 \sum_{l=1}^d \delta_{x_l}^2 U_J^0 - U_J^{-1}.$$

由以上两式消去 U^{-1}, 便可得到 U^1 的计算公式

$$U_J^1 = U_J^0 + \Delta t\, v_J^0 + \frac{1}{2}c^2 r^2 \sum_{l=1}^d \delta_{x_l}^2 U_J^0. \tag{4.8}$$

差分方程 (4.6)、(4.7) 和 (4.8) 联立起来称作是 Cauchy 问题 (4.1)、(4.2) 的显格式，此格式的截断误差阶为 $O(h^2 + \Delta t^2)$.

关于线性差分格式对于初值的稳定性，通常利用 Fourier 方法进行分析，首先判定 Von Neumann 条件 (稳定的必要条件). 对于格式 (4.6)~(4.8) 的 Von Neumann 条件为

$$cr = \frac{c\Delta t}{h} \le \frac{1}{\sqrt{d}}. \tag{4.9}$$

这是对于步长比值 $r = \frac{\Delta t}{h}$ 的一个限制条件.

分析波动方程差分格式稳定与收敛性的另一种方法是借助依赖域的概念. 设 (x_0,t_0) 为求解区域 $G=\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^+$ 中某一点, 称超平面 $t=0$ 上的球域

$$B_0=\{(x,0):|x-x_0|\le ct_0,\ x\in\mathbb{R}^n\}$$

为波动方程 (4.1) 的解在 (x_0,t_0) 点的**依赖域**. 此概念表明一个重要事实: 方程 (4.1) 的解在 (x_0,t_0) 点的值 $u(x_0,t_0)$ 仅仅依赖于 B_0 上指定的初始值, 而与超平面 $t=0$ 上其余部分的初值无关. 这里, 球域 B_0 恰好是 G 中锥体

$$D_{(x_0,t_0)}=\{(x,t):\ |x-x_0|\le c|t-t_0|,\ 0\le t\le t_0\}$$

与超平面 $t=0$ 之交 (底面). 波动方程存在有界的依赖域是与波的有限传播速度密切相关的, 它的这一特性与抛物方程有着截然区别. 对于波动方程的差分格式可以类似地定义其解 (差分解) 在某一剖分节点上的依赖域. 显格式 (4.6)~(4.8) 的解在 (x_J,t_n), $n>0$ 点的依赖域定义为初始层节点集合的那样一个子集 $B_{0h}\subset\{(x_J,0):J\in\mathbb{Z}^d\}$, 其上的初值是在按递推公式 (4.6) 计算 U_J^n 时实际要用到的, 显然 B_{0h} 是一个有限集. 基于依赖域判定波动方程差分格式收敛性的 Courant 条件 (必要性条件) 就是: *差分方程的依赖域包含微分方程的依赖域*. 下面, 就二维情形 ($d=2$) 进一步加以说明. 由图 4.1 可以看到, 此时 $D_{(x_J,t_n)}=\{(x,t):|x-x_J|\le c|t-t_n|,\ 0\le t\le t_n\}$ 是 (x_1,x_2,t) 空间中以 (x_J,t_n) 为顶点的圆锥体, 其轴线与 t 轴平行, 它的底面为 (x_1,x_2) 平面上以 x_J 为心的圆域: $|x-x_J|\le ct_n=cn\cdot\Delta t$, 此即微分方程解在 (x_J,t_n) 点的依赖域. 现在再来看差分解在 (x_J,t_n) 点的依赖域. 根据递推公式 (4.6) 右端的结构形式, 容易推断此格式解在 (x_J,t_n) 点的依赖域为如图 4.2 所示的菱形区域,

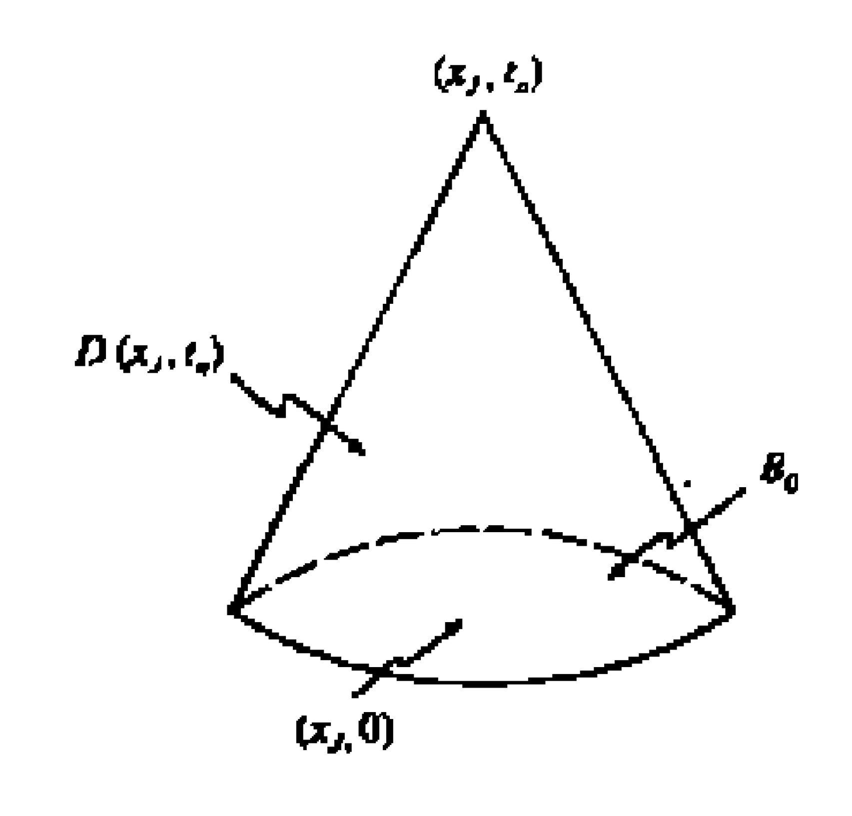


图 4.1 特征锥

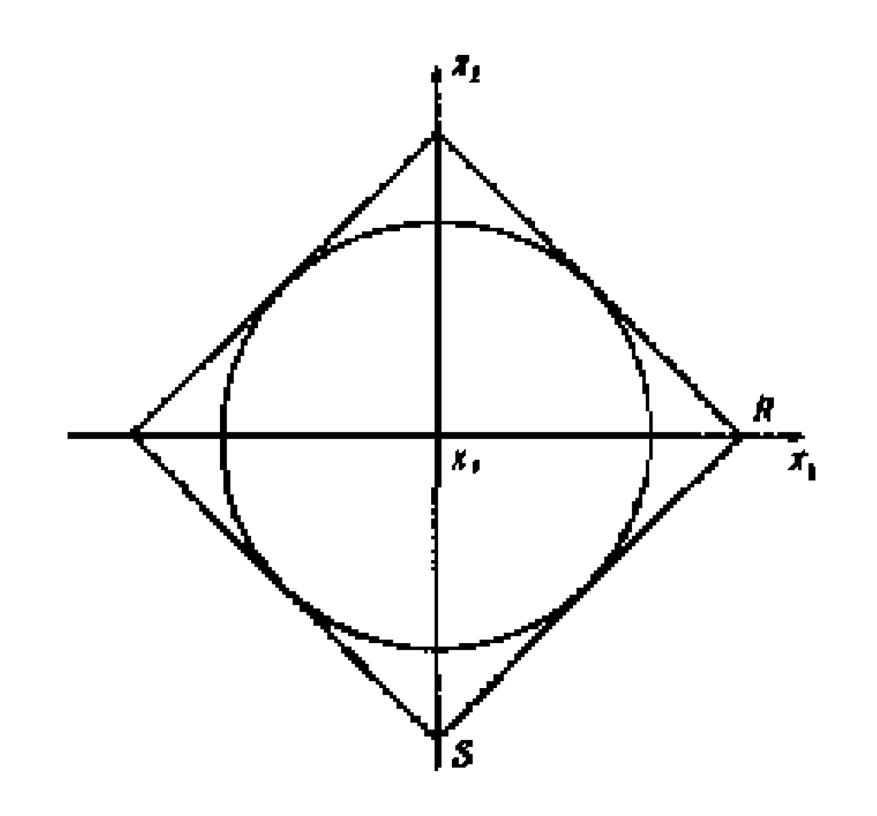


图 4.2 差分解依赖域

它的两条对角线分别平行于 x_1 轴和 x_2 轴并交于 x_J 点, 并有 $\overline{x_JR}=\overline{x_JS}=n\cdot h$. 于是, 这里 Courant 条件就是: 图 4.2 所示菱形区域包含圆域: $|x-x_J|\le cn\cdot\Delta t$, 此条件当且仅当 $cn\cdot\Delta t\le nh/\sqrt{2}$ 或

$$cr=c\frac{\Delta t}{h}\le\frac{1}{\sqrt{2}}\tag{4.10}$$

时成立. 条件 (4.10) 与前面的 Von Neumann 条件 ($d=2$) 是完全一致的.

波动方程初边值问题的有限元近似

不失一般性, 考虑如下初边值问题:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \displaystyle\sum_{i,j=1}^{d} \dfrac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{ij}(x)\dfrac{\partial u}{\partial x_j}\right) = f(x,t), \\ \qquad x \in \Omega, \ \ 0 < t \le T, \\ u = 0, \ x \in \partial\Omega, \ \ 0 \le t \le T, \\ u(x,0) = u^0(x), \ x \in \Omega, \\ \dfrac{\partial u}{\partial t}(x,0) = v^0(x), \ x \in \Omega, \end{cases} \tag{4.11}$$

其中 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 为有界区域, 设边界 $\partial\Omega$ 充分光滑, f, u^0 和 v^0 为已知函数. 假定 $a_{ij}(x) = a_{ji}(x) \in C^1(\overline{\Omega})$, 并满足如下一致椭圆条件: 存在常数 $\alpha > 0$ 使得

$$\sum_{i,j=1}^{d} a_{ij}(x)\xi_i\xi_j > \alpha \sum_{i=1}^{d} |\xi_i|^2, \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^d, \quad x \in \overline{\Omega}. \tag{4.12}$$

按第一章 §1.2 所介绍的方法, 对区域 Ω 进行剖分, 并构造 $H_0^1(\Omega)$ 的有限维子空间 S_h, 设其基函数为 $\{\phi_i(x)\}_{i=1}^{N_h}$. 根据 (4.11) 的弱形式:

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, v\right) + a(u,v) = (f,v), \ \forall v \in H_0^1(\Omega), \\ &a(u,v) = \int_\Omega \sum_{i,j=1}^{d} a_{ij}(x)\frac{\partial u}{\partial x_i}\frac{\partial v}{\partial x_j}\mathrm{d}x, \end{aligned} \tag{4.13}$$

上述初边值问题的 Galerkin 有限元近似定义为: 求 $u_h(t): [0,T] \to S_h$ 使得

$$\begin{cases} \left(\dfrac{\partial^2 u_h}{\partial t^2}, v_h\right) + a(u_h, v_h) = (f, v_h), \\ \qquad \forall v_h \in S_h, \ \ t \in (0,T], \\ u_h(0) = u_h^0 \in S_h, \\ \dfrac{\partial u_h}{\partial t}(0) = v_h^0 \in S_h. \end{cases} \tag{4.14}$$

将 u_h 按空间 S_h 的基底 $\{\phi_i(x)\}_{i=1}^{N_h}$ 展开

$$u_h(x,t) = \sum_{i=1}^{N_h} U_i(t)\phi_i(x),$$

并记 $U(t)=(U_1(t),U_2(t),\cdots,U_{N_h}(t))^{\mathrm{T}}$, 则 (4.14) 等价于下述二阶常微分方程组的初值问题:

$$\begin{cases} M\ddot{U}(t)+AU(t)=F(t), \quad 0<t<T, \\ U(0)=U^0, \quad \dot{U}(0)=V^0, \end{cases} \tag{4.15}$$

其中 M 和 A 分别是以 $(\phi_i,\ \phi_j)$ 和 $a(\phi_i,\ \phi_j)$ 为元素的 $N_h\times N_h$ 矩阵, U^0 和 V^0 分别是函数 $u_h^0(x)$ 和 $v_h^0(x)$ 按 $\{\phi_i(x)\}_{i=1}^{N_h}$ 展开所得系数组成的 N_h 维向量, $\ddot{U}(t)$ 前面的系数矩阵 M 称为质量矩阵.

在上述半离散化的基础上, 采用差分逼近方法将 (4.15) 中的时间变量进一步离散化, 即可建立初边值问题 (4.11) 的全离散求解计算格式. 为此, 设时间步长为 Δt, $t_n=n\Delta t$, 以 U^n 表示 $t=t_n$ 时刻的近似解. 下面介绍二类典型时间离散化格式.

格式 I (三层格式):

$$\begin{cases} M\dfrac{U^{n+1}-2U^n+U^{n-1}}{\Delta t^2}+\theta AU^{n+1} \\ \quad +(1-2\theta)AU^n+\theta AU^{n-1}, \\ \quad =\theta F^{n+1}+(1-2\theta)F^n+\theta F^{n-1},\ n=1,2,\cdots, \\ U^1=U^0+\Delta tV^0, \quad U^0\text{和}V^0\text{见}(4.15), \end{cases} \tag{4.16}$$

其中 $\theta\in[0,1]$ 为可选参数, 当 $\theta=\dfrac{1}{4}$ 时, 此格式关于时间变量是一个二阶精度格式.

格式 II (两层格式):

$$\begin{cases} M\dfrac{V^{n+1}-V^n}{\Delta t}+\theta_1AU^{n+1}+(1-\theta_1)AU^n \\ \quad =\theta_1F^{n+1}+(1-\theta_1)F^n, \\ \dfrac{U^{n+1}-U^n}{\Delta t}=\theta_2V^{n+1}+(1-\theta_2)V^n,\ n=0,1,\cdots. \end{cases} \tag{4.17}$$

此格式是由先令 $\dot{U}(t)=V$ 将 (4.15) 化成一阶方程组之后, 再作差分逼近导出的. 这里, $\theta_1,\theta_2\in[0,1]$ 为可选参数, 当 $\theta_1=\theta_2=\dfrac{1}{2}$ 时, 这个格式关于时间的逼近可达二阶精度, 一般情形仅为一阶精度.

关于稳定性和收敛性分析, 这里主要讨论一下半离散问题 (4.15). 首先分析近似解 $u_h(x,t)$ 关于初值 u_h^0, v_h^0 的稳定性. 设问题 (4.15) 的初值有扰动 δu_h^0, δv_h^0, 记

扰动后问题的解为 $\tilde{u}_h(x,t)$, 则 $w_h = \tilde{u}_h - u_h$ 满足

$$\left(\frac{\partial^2 w_h}{\partial t^2},\ v_h\right) + a(w_h, v_h) = 0,\ \forall v_h \in S_h, 0 < t \le T,$$

$$w_h(x,0) = \delta u_h^0, \quad \frac{\partial w_h}{\partial t}(x,0) = \delta v_h^0.$$

于上式中令 $v_h = \dfrac{\partial w_h}{\partial t}$, 并注意到 $a(\cdot,\cdot)$ 的对称与正定性 (见第一章 §1.2, (1.8) 式), 可得

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\left\|\frac{\partial w_h}{\partial t}\right\|^2 + a(w_h, w_h)\right) = 0,$$

对 t 积分之后, 有

$$\begin{aligned}\left\|\frac{\partial w_h}{\partial t}(t)\right\|^2 + \gamma\|w_h(t)\|_1^2 &\le \left\|\frac{\partial w_h}{\partial t}(0)\right\|^2 + a(w_h(0), w_h(0)) \\ &\le \|\delta v_h^0\|^2 + M\|\delta u_h^0\|_1^2,\ \forall t \in [0,T].\end{aligned} \tag{4.18}$$

此估计式表明近似解 $u_h(x,t)$ 在能量范数 (见 (4.3)) 的意义下是稳定的.

再来讨论近似解 $u_h(x,t)$ 的收敛性. 为此需假定子空间 $\{S_h, 0 < h < h_0\}$ 具有第一章 §1.2 所述逼近性质 (1.10). 如同抛物方程 Galerkin 有限元法的分析, 引进初边值问题 (4.11) 真解 $u(x,t)$ 的椭圆投影 $P_1 u$ (定义见第一章 §1.3, (1.28) 式), 并令

$$u_h - u = u_h - P_1 u + P_1 u - u = \theta_h + \eta.$$

为了方便, 假定半离散问题 (4.14) 中的初值选作

$$u_h^0 = P_1 u^0,\ v_h^0 = P_1 v^0. \tag{4.19}$$

不难看出, $\theta_h \in S_h$ 满足

$$\left\{\begin{aligned} &\left(\frac{\partial^2 \theta_h}{\partial t^2}, v_h\right) + a(\theta_h, v_h) = -\left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2}, v_h\right), \\ &\quad \forall v_h \in S_h,\ 0 < t \le T, \\ &\theta_h(0) = 0,\ \frac{\partial \theta_h}{\partial t}(0) = 0. \end{aligned}\right. \tag{4.20}$$

于上式中取 $v_h = \dfrac{\partial \theta_h}{\partial t}$, 可得

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\left\|\frac{\partial \theta_h}{\partial t}\right\|^2 + a(\theta_h, \theta_h)\right) &\le \left\|\frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2}\right\| \cdot \left\|\frac{\partial \theta_h}{\partial t}\right\| \\ &\le \frac{1}{2}\left\|\frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2}\right\|^2 + \frac{1}{2}\left\|\frac{\partial \theta_h}{\partial t}\right\|^2,\end{aligned}$$

两端对 t 积分，并注意到 $\theta_h(0)=\dfrac{\partial\theta_h}{\partial t}(0)=0$, 知

$$\left\|\frac{\partial\theta_h}{\partial t}(t)\right\|^2+a(\theta_h(t),\theta_h(t))\le\int_0^t\left(\left\|\frac{\partial^2\eta}{\partial t^2}(s)\right\|^2+\left\|\frac{\partial\theta_h}{\partial t}(s)\right\|^2\right)\mathrm{d}s,$$

其中 $a(\theta_h(t),\theta_h(t))\ge\gamma\|\theta_h(t)\|_1^2$. 至此，需要利用第一章引理 1.2(Gronwall 引理), 其时可令 $y(t)=\left\|\dfrac{\partial\theta_h(t)}{\partial t}\right\|^2+a(\theta_h(t),\theta_h(t))$, $\lambda(\tau)\equiv 1$, 而 α_0 则代表积分值 $\displaystyle\int_0^T\left\|\frac{\partial^2\eta}{\partial t^2}(s)\right\|^2\mathrm{d}s$. 由此，可得

$$\left\|\frac{\partial\theta_h}{\partial t}(t)\right\|^2+\|\theta_h(t)\|_1^2\le C(T)\int_0^t\left\|\frac{\partial^2\eta}{\partial t^2}(s)\right\|^2\mathrm{d}s. \tag{4.21}$$

由椭圆投影的误差估计 (第一章引理 1.1), 有

$$\left\|\frac{\partial^2\eta}{\partial t^2}(s)\right\|=\left\|(P_1-I)\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(s)\right\|\le Ch^\mu\left\|\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(s)\right\|_\mu,\ 2\le\mu\le r.$$

将它代入 (4.21), 我们得到

$$\left\|\frac{\partial\theta_h}{\partial t}(t)\right\|+\|\theta_h(t)\|_1\le C(T)h^\mu\left(\int_0^t\left\|\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(s)\right\|_\mu^2\mathrm{d}s\right)^{\frac12}, \qquad 2\le\mu\le r,\ 0\le t\le T, \tag{4.22}$$

其中 $C(T)$ 代表某一与 T 有关的常数. 类似地，已知

$$\|\eta(t)\|\le Ch^\mu\|u(t)\|_\mu,\quad \left\|\frac{\partial\eta(t)}{\partial t}\right\|\le Ch^\mu\left\|\frac{\partial u}{\partial t}(t)\right\|_\mu. \tag{4.23}$$

由 (4.22) 和 (4.23), 利用三角不等式证得

$$\begin{aligned}&\|u_h(t)-u(t)\|+\left\|\frac{\partial}{\partial t}(u_h(t)-u(t))\right\|\\&\le C(T)h^\mu\left\{\|u(t)\|_\mu+\left\|\frac{\partial u}{\partial t}\right\|_\mu+\left(\int_0^t\left\|\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(s)\right\|_\mu^2\mathrm{d}s\right)^{\frac12}\right\},\\&\qquad 2\le\mu\le r,\ 0\le t\le T.\end{aligned} \tag{4.24}$$

此估计式表明，当 $u,\dfrac{\partial u}{\partial t}\in L^\infty(0,T;H^\mu(\Omega))$, $\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}\in L^2(0,T;H^\mu(\Omega))$, $\mu>2$ 时，近似解 $u_h(x,t)$ 及其导数 $\dfrac{\partial u_h}{\partial t}(x,t)$ 均收敛 (当 $h\to 0$), 并证得如下定理结果.

定理 4.2 设空间 S_h 满足第一章 §1.2 中假定条件 (1.10), 并设 $u_h^0 = P_1u^0$, $v_h^0 = P_1v^0$. 如果问题 (4.11) 的真解 u 具有正则性:

$$u,\ \frac{\partial u}{\partial t} \in L^\infty(0,T;H^r(\Omega)),\ \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \in L^2(0,T;H^r(\Omega)),$$

则由 (4.14) 所定义的近似解满足误差估计式

$$\|u_h(t)-u(t)\| + \left\|\frac{\partial}{\partial t}(u_h(t)-u(t))\right\| \le C(T,u)h^r,\ 0 \le t \le T.$$

注 在 [45] 中, 基于估计式 (4.22) 中对 $\|\theta_h(t)\|_1$ 的估计和 S_h 上的一个弱嵌入不等式, 对于线性有限元 ($r=2$) 法的近似解证得下述按 $L^\infty(\Omega)$ 范数的误差估计:

$$\|u_h(t)-u(t)\|_{L^\infty(\Omega)} \le$$

$$Ch^2\left(\ln\frac{1}{h}\right)\left\{\|u\|_{L^\infty(0,T;W^{2,\infty}(\Omega))} + \|u_{tt}\|_{L^2(0,T;W^{2,2}(\Omega))}\right\}.$$

人工边界上边值条件的近似确定方法

在应用中, 当 Ω 为无界区域时, 为缩减计算和存储量, 常需引入人工边界, 将无界区域化为有界区域, 此时在人工边界上需要附加相应边值条件. 这种边界条件应满足以下要求: 首先, 新的有界区域上的初边值问题是适定的; 其次, 为保证新问题的解是原问题解的足够好的近似, 要求在人工边界上避免产生非物理反射波. 此类边界条件称为无反射人工边界条件 (或吸收边界条件).

为便于了解上述问题, 先来考察一维声波方程的初值问题:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0,\ -\infty < x < +\infty, t > 0, \tag{4.25}$$

$$u(x,0) = u^0(x),\ \frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = v^0(x),\ -\infty < x < +\infty. \tag{4.26}$$

已知方程 (4.25) 的通解为

$$u(x,t) = \phi_1(x-ct) + \phi_2(x+ct),$$

其中 ϕ_1, ϕ_2 为任意函数, 分别满足方程

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} + c\frac{\partial \phi_1}{\partial x} = 0 \text{ 和 } \frac{\partial \phi_2}{\partial t} - c\frac{\partial \phi_2}{\partial x} = 0, \tag{4.27}$$

$\phi_1(x-ct)$ 代表沿 x 正方向传播的波, 而 $\phi_2(x+ct)$ 则代表沿 x 负方向传播的波. 若初始值函数 $u^0(x)$ 和 $v^0(x)$ 具有紧支集并属于有限区间 $0 < x < L$, 则可将问题

(4.25) 、 (4.26) 化为如下有界区域上的初边值问题:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad 0 < x < L, \, t > 0, \tag{4.28}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} - c \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad x = 0, \, t \geq 0, \tag{4.29}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad x = L, \, t \geq 0, \tag{4.30}$$

$$u(x,0) = u^0(x), \; \frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = v^0(x), \; 0 < x < L, \tag{4.31}$$

其中 (4.29) 和 (4.30) 就属于 $x = 0$ 和 $x = L$ 两条人工边界线上的无反射边界条件，它是根据单程波方程 (4.27) 给出的.

在上面的例子中，利用将波动算子 $\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ 分解为两个一阶微分算子 $\frac{\partial}{\partial t} - c\frac{\partial}{\partial x}$ 和 $\frac{\partial}{\partial t} + c\frac{\partial}{\partial x}$ (单程波算子) 的方法确定无反射人工边界条件. 对于高维波动方程，直接实现上述单程波分解是困难的. 但仍可借助符号方程 (拟微分算子) 的形式进行分解，并采用恰当的逼近方法建立近似的无反射人工边界条件. 下面以二维波动问题:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} \right) = 0, \; x_1 > 0, \, x_2 \in \mathbb{R} \tag{4.32}$$

为例来讨论这一问题，这里 $x_1 = 0$ 即坐标平面 (x_2, t) 的上半部分 $(t \geq 0)$ 为人工边界. 方程 (4.32) 的平面波解为

$$u(x,t) = e^{i(\omega t + \xi_1 x_1 + \xi_2 x_2)}, \; i = \sqrt{-1}, \tag{4.33}$$

其中 ω 为波的频率， ξ_1 和 ξ_2 为波数，而 (ξ_1, ξ_2) 代表波的传播方向. 将 (4.33) 代入方程 (4.32)，知 ω, ξ_1 和 ξ_2 应满足关系式

$$\omega^2 - c^2(\xi_1^2 + \xi_2^2) = 0 \tag{4.34}$$

我们看到此式恰好是 (4.32) 的符号方程. 令 $\frac{\xi_1 c}{\omega} = \cos\theta$, $\frac{\xi_2 c}{\omega} = \sin\theta = s$，其中 θ 为入射角，即波的传播方向与 x_1 轴之间的夹角. (4.34) 可改写为

$$\left(i\xi_1 - \frac{i\omega}{c}\sqrt{1-s^2} \right) \left(i\xi_1 + \frac{i\omega}{c}\sqrt{1-s^2} \right) = 0, \tag{4.35}$$

上式左端的两个因式是二维波动算子的向 $x_1 > 0$ 方向和 $x_1 < 0$ 方向传播的单程波的拟微分算子. 为了得到微分形式的单程波方程，需要采用适当的有理函数 $r(s) = P_m(s)/Q_n(s)$ ($P_m(s)$ 和 $Q_n(s)$ 分别代表 m 阶和 n 阶多项式) 来逼近平方根函数 $\sqrt{1-s^2}$. 这样一来，由分解式 (4.35) 可得如下两个单程波符号方程:

$$ci\xi_1 Q_n(s) \pm i\omega P_m(s) = 0, \; s = \frac{c\xi_2}{\omega}$$

即

$$\sum_{j=0}^{n} q_j \left(\frac{c\xi_2}{\omega}\right)^j ci\xi_1 \pm i\omega \sum_{j=0}^{m} p_j \left(\frac{c\xi_2}{\omega}\right)^j = 0.$$

令 $k = \max\{n, m-1\}$, 作代换: $i\omega \to \dfrac{\partial}{\partial t}$, $i\xi_1 \to \dfrac{\partial}{\partial x_1}$ 和 $i\xi_2 \to \dfrac{\partial}{\partial x_2}$, 得到如下近似单程波微分方程

$$\sum_{j=0}^{n} q_j c^{j+1} \frac{\partial^{k+1} u}{\partial t^{k-j} \partial x_1 \partial x_2^j} \pm \sum_{j=0}^{m} p_j c^j \frac{\partial^{k+1} u}{\partial t^{k-j+1} \partial y^j} = 0. \tag{4.36}$$

若取不同的有理函数 $r(s)$, 那么相应的近似单程波方程也就不同. 对于波动问题 (4.32), 人工边界 $x = 0$ 处的无反射边界条件由 (4.36) 中带负号的那个单程波方程给出. 下面, 就此问题介绍几个近似无反射边界条件的例子.

Clayton-Engquist-Majda[46] 边界条件: 这种边界条件是基于平方根函数 $\sqrt{1-s^2}$ 的 Padé 逼近, 即取

$$r^{(1)}(s) \equiv 1, \ r^{(k+1)}(s) = 1 - \frac{s^2}{1 + r^{(k)}(s)}, \ k \geq 1.$$

由此得到不同精度阶的边界条件:

$$B_1 u = \frac{1}{c}\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial u}{\partial x_1} = 0;$$

$$B_2 u = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{1}{c}\frac{\partial^2 u}{\partial t \partial x_1} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} = 0;$$

$$B_{N+1} u = \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} B_N u - \frac{1}{4}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} B_{N-1} u = 0.$$

Halpern-Trefethen[47] 边值条件: 取 $r(s)$ 为平方根函数 $\sqrt{1-s^2}$ 在 $[-1,1]$ 区间上的插值函数, 插值节点是 Chebyshev 点:

$$s_k = \sin\theta_k, \ \theta_k = -\frac{\pi}{2} + \frac{\pi\left(k - \frac{1}{2}\right)}{2K}, \ 1 \leq k \leq 2K.$$

若令 $p(t) = (t - \sqrt{1-s_1^2}) \cdots (t - \sqrt{1-s_K^2})$, 则上述插值函数具有表达式

$$r(s) = \frac{p(-t) + p(t)}{t^{-1}(p(-t) - p(t))}, \ t = \sqrt{1-s^2}.$$

因上式右端的分子和分母都是 t 的偶函数, 所以 $r(s)$ 为 s 的有理函数.

Higdon[48] 边界条件: 此边界条件具形式

$$\prod_{j=1}^{K} \left(\cos\theta_j \frac{\partial}{\partial t} - c\frac{\partial}{\partial x}\right) u = 0,$$

其中 $|\theta_j| < \frac{\pi}{2}$, $1 \le j \le K$. 所有传播速度为 c、具有入射角 $\pm\theta_1, \pm\theta_2, \cdots, \pm\theta_K$ 的平面波及其线性组合均满足上述方程. 所以，当 k 足够大时， Higdon 边界条件近乎对任何入射波都具有吸收非物理反射波的良好效果.

§4.3 一阶双曲方程的经典差分格式

本节以一维非线性守恒方程式的 Cauchy 问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + \dfrac{\partial f(u)}{\partial x} = 0\,, \\ u(x,0) = u^0(x) \end{cases} \tag{4.37}$$

为典型例子，介绍某些常见、重要的差分格式.

众所周知，对于问题 (4.37), 即使初值 $u^0(x)$ 充分光滑，其解也有可能出现间断，如激波等现象. 人们对于如何构造具有局部守恒性质、在光滑解区域保持高阶精度并对于激波具有高分辨能力的差分格式进行过长期、大量的探索研究工作 (参看 [32]、[33]).

以下，设 $x_j = jh, t_n = n\Delta t$, $h, \Delta t > 0$ 分别代表空间和时间步长，$u_j^n = u(x_j, t_n)$. 求解 (4.37) 的守恒型差分格式的一般形式为

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} + \frac{g_{j+\frac{1}{2}}^n - g_{j-\frac{1}{2}}^n}{h} = 0, \tag{4.38}$$

其中 $g_{j+\frac{1}{2}} = g(U_{j+m}, \cdots, U_{j-m+1})$, g 满足: $g(U, \cdots, U) = f(U)$. 通常称函数 $g_{j+\frac{1}{2}} = g(U_{j+m}, \cdots, U_{j-m+1})$ 为数值流通量.

Lax 格式 (1954):

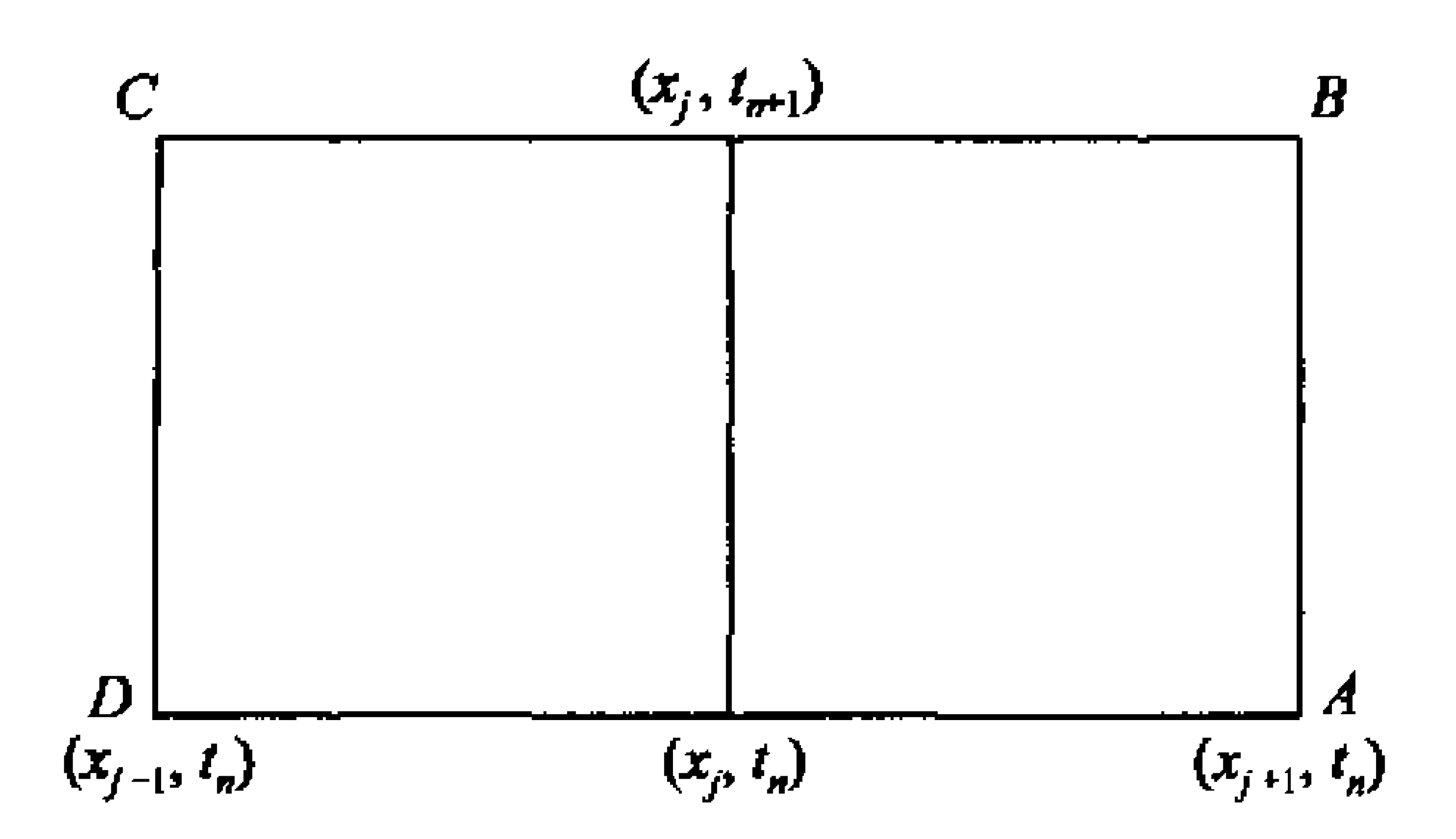
$$\frac{U_j^{n+1} - \frac{1}{2}(U_{j-1}^n + U_{j+1}^n)}{\Delta t} + \frac{f_{j+1}^n - f_{j-1}^n}{2h} = 0, \\ j = 0, \pm 1, \cdots; n = 0, 1, \cdots, \tag{4.39}$$

此格式是由在如图所示矩形曲线 ABCDA 上的下述积分恒等式与近似公式导出的:

$$\int \big(f(U)\,\mathrm{d}t - U\,\mathrm{d}x\big) = \int_{\overline{AB}} f\,\mathrm{d}t - \int_{\overline{BC}} U\,\mathrm{d}x \\ + \int_{\overline{CD}} f\,\mathrm{d}t - \int_{\overline{DA}} U\,\mathrm{d}x = 0,$$

$$\int_{\overline{AB}} f\,\mathrm{d}t \approx \Delta t \cdot f_{j+1}^n,$$

$$-\int_{\overline{BC}} U\,\mathrm{d}x \approx 2h \cdot U_j^{n+1},$$



$$\begin{aligned}\int_{\overline{CD}} f\,\mathrm{d}t &\approx -\Delta t\cdot f_{j-1}^n,\\ -\int_{\overline{DA}} U\,\mathrm{d}x &\approx -h\cdot(U_{j-1}^n+U_{j+1}^n)\,.\end{aligned}$$

Lax-Wendroff 格式 (1962):

$$\begin{aligned}&U_j^{n+1}=U_j^n-\frac{r}{2}(f_{j+1}^n-f_{j-1}^n)\\ &+\frac{r^2}{2}[f'(U_{j+\frac12}^n)(f_{j+1}^n-f_j^n)-f'(U_{j-\frac12}^n)(f_j^n-f_{j-1}^n)],\end{aligned} \tag{4.40}$$

$$j=0,\pm1,\cdots;n=0,1,\cdots,$$

其中

$$U_{j+\frac12}=\frac12(U_{j+1}+U_j)\ ,\quad r=\frac{\Delta t}{h}\,.$$

上式格式可看作是如下带扰动项方程

$$\frac{\partial U}{\partial t}+f'(U)\frac{\partial U}{\partial x}=\frac{\Delta t}{2}(f'(U))^2\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

通过中心差分逼近导出的，具有二阶精度.

Engquist-Osher 格式 (1980,1981):

$$U_j^{n+1}=U_j^n-\frac{\Delta t}{h}(\Delta_+f_-(U_j^n)+\Delta_-f_+(U_j^n)), \tag{4.41}$$

其中

$$f_+(U)=\int_0^U \mathcal{X}(s)f'(s)\,\mathrm{d}s\ ,\ f_-(U)=\int_0^U\big(1-\mathcal{X}(s)\big)f'(s)\,\mathrm{d}s$$

$$\mathcal{X}(U)\equiv1\ \ \text{当} f'(U)\ge0\ ,\ \mathcal{X}(U)\equiv0\ \ \text{当} f'(U)<0$$

$$\Delta_\pm U_j=\pm(U_{j\pm1}-U_j).$$

此格式是一个单调守恒格式，仅具有一阶精度．后来对于 $f(U)$ 为凸函数且 $\overline{U}$ 为 $f'(U)$ 惟一零点的情形，Engquist 和 Osher(1981) 又提出了如下具有二阶精度的格式：

$$\begin{aligned} U_j^{n+1} =& U_j^n - \frac{\Delta t}{h}\left\{\left(\Delta_+ f_-(U_j^n) - \frac{1}{2}\Delta_+(f'_-(Z_j^n)\Delta_+ U_j^n)\right)\right. \\ &\left.+\left(\Delta_- f_+(U_j^n) + \frac{1}{2}\Delta_-(f'_+(W_j^n)\Delta_- U_j^n)\right)\right\}, \end{aligned} \tag{4.42}$$

其中

$$Z_j^n = \begin{cases} \max(U_j, U_{j+1}), & \text{当 } U_{j-1} < \overline{U}, \\ \overline{U}, & \text{当 } U_{j-1} \geq \overline{U}, \end{cases}$$

$$W_j^n = \begin{cases} \min(U_j, U_{j-1}), & \text{当 } U_{j+1} > \overline{U}, \\ \overline{U}, & \text{当 } U_{j+1} \leq \overline{U}. \end{cases}$$

Godunov 格式 (1959)：

$$\begin{gathered} U_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} = U_{j+\frac{1}{2}}^n - \frac{\Delta t}{h}[f(\overline{U}_{j+1}^n) - f(\overline{U}_j^n)], \\ j = 0, \pm 1, \cdots; n = 0, 1, \cdots, \end{gathered} \tag{4.43}$$

其中 $U_{j+\frac{1}{2}}^n$ 当作为解 $u(x,t)$ 于时刻 t_n 在区间 $[x_j, x_{j+1})$ 上的平均值，$\overline{U}_j^n$ 代表 Riemann 问题：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial U}{\partial t} + \dfrac{\partial f(U)}{\partial x} = 0, & t_n < t \leq t_{n+1}, \\ U(x,0) = \begin{cases} U_{j-\frac{1}{2}}^n, & x \leq x_j, \\ U_{j+\frac{1}{2}}^n, & x > x_j \end{cases} \end{cases}$$

的解 (根据解的自相似性，U 在直线 $x = x_j$ 上取相同的值)．

前面所介绍的各个格式都不难推广到非线性守恒方程组的情形．例如，在 Euler 坐标中，一维可压缩气体的动力学方程组为：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \dfrac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0, & \text{(连续性方程)} \\ \dfrac{\partial u}{\partial t} + u\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial p}{\partial x} = 0, & \text{(动量方程)} \\ \rho\dfrac{\partial E}{\partial t} + u\dfrac{\partial E}{\partial x} + p\dfrac{\partial u}{\partial x} = 0, & \text{(能量方程)} \\ p = f(\rho, E), & \text{(状态方程)} \end{cases} \tag{4.44}$$

其中 ρ 为气体密度，u 为速度，p 是压力，E 是比内能. 令 $m=\rho u$, $e=\rho\left(E+\frac{u^2}{2}\right)$, $U=(\rho\ ,m\ ,e)^T$ 和

$$F(U)=(m\ ,\frac{m^2}{\rho}+p\ ,\frac{m}{\rho}(e+p))^T,$$

则可将 (4.44) 表示成

$$\frac{\partial U}{\partial t}+\frac{\partial F(U)}{\partial x}=0. \tag{4.45}$$

由此，便可写出求解方程组 (4.44) 的 Lax 格式 (分量形式):

$$\begin{cases} \dfrac{\rho_j^{n+1}-\frac{1}{2}(\rho_{j-1}^n+\rho_{j+1}^n)}{\Delta t}+\dfrac{m_{j+1}^n-m_{j-1}^n}{2h}=0, \\ \dfrac{m_j^{n+1}-\frac{1}{2}(m_{j-1}^n+m_{j+1}^n)}{\Delta t}+\dfrac{(m_{j+1}^n)^2}{2h\rho_{j+1}^n}-\dfrac{(m_{j-1}^n)^2}{2h\rho_{j-1}^n} \\ \qquad +\dfrac{p_{j+1}^n-p_{j-1}^n}{2h}=0, \\ \dfrac{e_j^{n+1}-\frac{1}{2}(e_{j-1}^n+e_{j+1}^n)}{\Delta t}+\dfrac{m_{j+1}^n}{2h\rho_{j+1}^n}(e_{j+1}^n+p_{j+1}^n) \\ \qquad -\dfrac{m_{j-1}^n}{2h\rho_{j-1}^n}(e_{j-1}^n+p_{j-1}^n)=0, \\ p_j^n=f\left(e_j^n\ ,\dfrac{e_j^n}{\rho_j^n}-\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{m_j^n}{\rho_j^n}\right)^2\right). \end{cases} \tag{4.46}$$

最后，应该指出前面各个格式均属于条件稳定格式，也就是说当它们应用于守恒方程式 (4.37) 或方程组 (4.45) 时均需对于网格步长 $\Delta t,h$ (通常是比例 $r=\frac{\Delta t}{h}$) 加某种限制，此时才能保证数值计算的稳定性. 这种限制条件通常是对于线性、常系数方程 (视 $A(U)=F'(U)$ 为常数矩阵), 通过 Fourier 分析方法建立的，称为 VonNeumann 条件，自然它仅为保证格式稳定的一种必要条件. 例如，对于方程组 (4.45), Lax 格式的 VonNeumann 条件为

$$r|\lambda(A)|_{\max}\le 1\ , \tag{4.47}$$

其中 $r=\frac{\Delta t}{h}$,$A=F'(U)$. 其次，上面所介绍的格式均属守恒型格式. P. D. Lax 和 B. Wendroff(1960) 曾严格证明：守恒型格式 (4.38) 的解 U^n 必定有界地几乎处处收敛 (当 $h,\Delta t\to o$), 并且其极限函数 $U(x,t)$ 是 Cauchy 问题 (4.37) 的一个弱解.

§4.4 间断有限元法

间断有限元法是采用在单元交界处完全间断的分片多项式空间作为试探与检验函数空间的一类有限元方法. 间断 Galerkin 有限元法，最初是为求解中子输运问题提出 (见 [34],[35]), 后来该方法在求解一阶双曲和非线性守恒方程等方面得到了重要发展 (见 [36]~[43]).

中子输运问题与间断有限元分析

设 Ω 是 (x,y) 平面上一凸多边形区域，$\underline{n}=(n_x,n_y)$ 代表边界 $\partial\Omega$ 的单位外法向量，μ 和 ν 为实参数，满足 $\mu^2+\nu^2\le 1$. 考虑问题：求函数 $u(x,y)$, 满足

$$\begin{cases} \mu\dfrac{\partial u}{\partial x}+\nu\dfrac{\partial u}{\partial y}+\sigma u=f\ ,\ \text{于 } \Omega \text{ 内}, \\ u=g\ ,\ \text{在 } \Gamma_-=\{\ (x,y)\in\partial\Omega\ :\mu n_x+\nu n_y<0\}\text{上}, \end{cases} \tag{4.48}$$

其中 σ,f,g 为给定函数，且 $\sigma(x,y)\ge\sigma_0>0$，σ_0 为正常数. 问题 (4.48) 来源于中子输运问题.

设 $\Omega_h=\{K\}$ 是区域 Ω 的正则剖分，K 代表剖分中任一单元，其边界 ∂K 上的单位外法向量记为 $\underline{n}(x,y)$，$\underline{\beta}=(\mu,\nu)$. 定义

$$\partial K_-=\{\ (x,y)\in\partial K\ :\underline{\beta}\cdot\underline{n}(x,y)<0\}\quad \text{流入部分},$$

$$\partial K_+=\{\ (x,y)\in\partial K\ :\underline{\beta}\cdot\underline{n}(x,y)\ge 0\}\quad \text{流出部分}.$$

引进有限维函数空间

$$S_h=\{\ v_h\in L_2(\Omega)\ :v_h|_K\in P_r\ ,\forall\ K\in\Omega_h\}, \tag{4.49}$$

P_r 为次数 $<r$ 的多项式集合 $(r\ge 1)$.

记

$$(w,v)_K=\int_K wv\,\mathrm{d}x\ ,\qquad <w,v>_{\partial K}=\int_{\partial K} wv\,\mathrm{d}s\ ,$$
$$\|w\|_K=(w,w)_K^{\frac12}\ ,\qquad \|w\|_{\partial K}^2=\int_{\partial K} w^2|\underline{\beta}\cdot\underline{n}|\,\mathrm{d}s\ ,$$
$$|g|_{\Gamma_-}^2=\int_{\Gamma_-} g^2|\underline{\beta}\cdot\underline{n}|\,\mathrm{d}s\ .$$

从定义 (4.49) 看到，空间 S_h 中的函数 v_h 在单元交界处允许是间断的. 作为问题 (4.48) 的近似，考虑如下离散模型：求 $u_h\in S_h$, 使满足

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{K\in\ \Omega_h}\{-(u_h,v_\beta)_K+<\widetilde{u}_h,v>_{\partial K}\}+(\sigma u_h,v) \\ \qquad =(f,v),\quad \forall\ v\in S_h, \\ \widetilde{u}_h=u_h^-=g\ ,\qquad \text{在 } \Gamma_-\ \text{上}, \end{cases} \tag{4.50}$$

其中 $(\cdot,\cdot)$ 表示 $L^2(\Omega)$ 中内积，$v_\beta=\mu\dfrac{\partial v}{\partial x}+\nu\dfrac{\partial v}{\partial y}$，而 $\widetilde{u}_h$ 在 ∂K 上的取值由下式定义：

$$\widetilde{u}_h=\begin{cases} u_h^+, & \text{在 } \partial K_+ \text{ 上}, \\ u_h^-, & \text{在 } \partial K_- \text{ 上}, \end{cases} \tag{4.51}$$

u_h^+,u_h^- 分别是 u_h 在 ∂K 上沿 K 的内侧方向和外侧方向的极限值.

引用双线性泛函

$$B(w,v)=\sum_{K\in\,\Omega_h}\{-(w,v_\beta)_K+<\widetilde{u}_h,v>_{\partial K}\}+(\sigma w,v), \tag{4.52}$$

则可将 (4.50) 写成

$$\begin{cases} B(u_h,v)=(f,v)\ , \quad \forall\, v\in S_h, \\ u_h|_{\Gamma_-}=g. \end{cases} \tag{4.53}$$

引理 4.1 对任意 $f\in L^2(\Omega)$ 和 $g\in L^2(\Gamma_-)$，离散问题 (4.50) 存在惟一解 u_h 并满足

$$\sum_{S\in\,\Omega_h}\int_S [u_h]^2|\underline{\beta}\cdot\underline{n}|\,\mathrm{d}s+\|u_h\|^2\le C\{\|f\|^2+|g|^2_{\Gamma_-}\} \tag{4.54}$$

其中 $[u_h]=u_h^+-u_h^-$，左端的求和取遍 Ω_h 中所有的单元边线.

证明 设 v 是 Ω_h 上任一分片光滑函数，且 $v|_{\Gamma_+}=0$. 先证明如下恒等式：

$$\begin{aligned} B(v,v)= \ & \frac{1}{2}\sum_S\int_S [v]^2|\underline{n}\cdot\underline{\beta}|\mathrm{d}s+(\sigma v,v) \\ & -\frac{1}{2}\int_{\Gamma_-}(v^-)^2|\underline{n}\cdot\underline{\beta}|\mathrm{d}s. \end{aligned} \tag{4.55}$$

在 $K\in\Omega_h$ 上，由 Green 公式可得

$$\int_K vv_\beta\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\frac{1}{2}\int_{\partial K}(v^+)^2\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s,$$

于是有

$$\begin{aligned} &\sum_{K\in\Omega_h}\{-(v,v_\beta)_K+<\widetilde{v},v>_{\partial K}\} \\ &=\frac{1}{2}\sum_{K\in\Omega_h}\left\{-\int_{\partial K}(v^+)^2\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s+2\int_{\partial K}\widetilde{v}v^+\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s\right\} \\ &=\frac{1}{2}\sum_{K\in\Omega_h}\left\{-\int_{\partial K_-}(v^+)^2\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s+\int_{\partial K_+}(v^+)^2\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s\right. \\ &\qquad\left.+2\int_{\partial K_-}v^-v^+\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s\right\}. \end{aligned}$$

注意到

$$
\begin{aligned}
-\sum_{K\in\Omega_h}\int_{\partial K_-}(v^+)^2\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s = & \sum_{K\in\Omega_h}\int_{\partial K_+}(v^-)^2\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s\\
& -\int_{\Gamma_-}(v^+)^2\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s
\end{aligned}
$$

和

$$
\begin{aligned}
\sum_{K\in\Omega_h}\int_{\partial K_-}v^-v^+\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s = & -\sum_{K\in\Omega_h}\int_{\partial K_+}v^+v^-\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s\\
& +\int_{\Gamma_-}v^-v^+\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s,
\end{aligned}
$$

由 (4.52) 和上式可得

$$
\begin{aligned}
B(v,v) = & \frac{1}{2}\sum_{K\in\Omega_h}\left\{\int_{\partial K_+}(v^-)^2\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s+\int_{\partial K_+}(v^+)^2\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s\right.\\
& \left.-2\int_{\partial K_+}v^+v^-\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s\right\}-\frac{1}{2}\int_{\Gamma_-}(v^+)^2\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s\\
& +\int_{\Gamma_-}v^-v^+\underline{n}\cdot\underline{\beta}\mathrm{d}s+(\sigma v,v)\\
= & \frac{1}{2}\sum_S\int_S[v]^2|\underline{n}\cdot\underline{\beta}|\mathrm{d}s-\frac{1}{2}\int_{\Gamma_-}(v^-)^2|\underline{n}\cdot\underline{\beta}|\mathrm{d}s+(\sigma v,v),
\end{aligned}
$$

即证恒等式 (4.55).

在 (4.53) 中取 $v=u_h$，利用恒等式 (4.55) 和 Schwarz 不等式，我们得到

$$
\begin{aligned}
& \frac{1}{2}\sum_S\int_S[u_h]^2|\underline{n}\cdot\underline{\beta}|\mathrm{d}s+(\sigma u_h,u_h)-\frac{1}{2}\int_{\Gamma_-}g^2|\underline{n}\cdot\underline{\beta}|\mathrm{d}s\\
& \quad =(f,u_h)\le\frac{1}{2}(\sigma u_h,u_h)+C\|f\|^2.
\end{aligned}
$$

由此引理便得证.

对于 Ω_h 上的分片光滑函数 v，定义如下范数

$$
\|v\|_h=\left\{\|v\|^2+\sum_{K\in\,\Omega_h}h\|v_\beta\|_K^2+\sum_S\int_S[v]^2|\underline{\beta}\cdot\underline{n}|\,\mathrm{d}s\right\}^{\frac{1}{2}}. \tag{4.56}
$$

定理 4.3 设 u 和 u_h 分别是问题 (4.48) 和 (4.50) 的解. 假设 $u\in H^r(\Omega)$，$r\geq 1$，则当 h 足够小时如下估计式成立

$$
\|u_h-u\|_h\le Ch^{r-\frac{1}{2}}\|u\|_r\,. \tag{4.57}
$$

定理 4.3 的证明见 [37]. 起先， P. Lesaint 和 P. A. Raviart 在文献 [35] 中对上述间断有限元法进行过理论分析. 其后，文献 [36] 和 [37] 改进了 [35] 中的理论结果，使收敛速度估计提高半阶 (关于网格参数 h). 文献 [38] 研究过非线性涡度传输方程的间断有限元法，证明了近似解在 L^p- 范数 $(1 \le p \le +\infty)$ 意义下的稳定性. 文献 [52] 将间断有限元法应用到 Tricomi 问题.

一阶双曲和非线性守恒方程

先考虑如下一阶线性双曲方程式的初值问题：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - a\dfrac{\partial u}{\partial x} = 0\ , & a > 0\text{常数}\ , t > 0, \\ u(x,0) = u^0(x)\ , & -\infty < x < \infty\ . \end{cases} \tag{4.58}$$

给定 $h > 0$, 记 $x_j = jh$, $x_{j+\frac{1}{2}} = \dfrac{x_j + x_{j+1}}{2}$, $I_j = [x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}]$ 取作为单元. 构造由分段多项式组成的有限元空间

$$V_h = \{v \in L^2(R) : \text{在每个单元 } I_j \text{ 上 } v \text{ 是次数不超过 } r \text{ 的多项式}\}.$$

在区间 I_j 上，用函数 $v \in V_h$ 与方程 (4.58) 两端作内积乘，利用分部积分公式，可得

$$\begin{aligned} &\int_{I_j} \frac{\partial u}{\partial t} v\,\mathrm{d}x + a\int_{I_j} u\frac{\partial v}{\partial x}\,\mathrm{d}x \\ &\quad -a\big\{u(x_{j+\frac{1}{2}})v(x_{j+\frac{1}{2}}) - u(x_{j-\frac{1}{2}})v(x_{j-\frac{1}{2}})\big\} = 0, \end{aligned} \tag{4.59}$$

此式将是建立间断有限元法的出发点. 然而，由于函数 u(试探函数) 和 v(检验函数) 在 I_j 的端点 $x_{j\pm\frac{1}{2}}$ 处是间断的，因此 (4.59) 式中的函数值 $u(x_{j\pm\frac{1}{2}}), v(x_{j\pm\frac{1}{2}})$ 必需加以说明、进一步规定.

用 $w^-_{j+\frac{1}{2}}$, $w^+_{j+\frac{1}{2}}$ 表示函数 $w(x)$ 在节点 $x_{j+\frac{1}{2}}$ 的左极限值和右极限值. 以下，对于公式 (4.59) 中出现的端点函数值作如下规定：

1. 对于函数 v , $v(x_{j\pm\frac{1}{2}})$ 恒取为 v 在 I_j 内侧的极限值，即 $v(x_{j-\frac{1}{2}}) = v^+_{j-\frac{1}{2}}$, $v(x_{j+\frac{1}{2}}) = v^-_{j+\frac{1}{2}}$.

2. 对于函数 u , 基于特征线的走向，规定 $u(x_{j-\frac{1}{2}}) = u^+_{j-\frac{1}{2}}$, $u(x_{j+\frac{1}{2}}) = u^+_{j+\frac{1}{2}}$.

将 V_h 中函数限制在 I_j 上构成一个局部空间，记为 $V_h(I_j)$, 其维数是 $r+1$. 适当选取 $V_h(I_j)$ 的基函数 $\{\phi_{j,i}(x)\}_{i=1}^{r+1}$, 并设

$$\begin{aligned} &u_h(x,t) = \sum_{i=1}^{r+1} U_{j,i}(t)\phi_{j,i}(x)\ , \qquad x \in I_j, \\ &U_j = (U_{j,1}, U_{j,2}, \cdots, U_{j,r+1})^T \end{aligned} \tag{4.60}$$

用表示式 (4.60) 取代 (4.59) 中的函数 u，并依次地取 v 为基函数 $\phi_{j,1}(x),\phi_{j,2}(x),\cdots,\phi_{j,r+1}(x)$，则可推导出如下块状的一阶线性常微分方程

$$M\frac{\mathrm{d}U_j}{\mathrm{d}t}-\frac{a}{h}(AU_{j+1}-BU_j)=0 \tag{4.61}$$

其中 M,A,B 为 $(r+1)\times(r+1)$ 阶矩阵, M 是非奇异的 (质量矩阵), 故 M^{-1} 存在.

半离散问题 (4.61), 可以通过进一步差分逼近得到全离散格式. 作为特例, 考察 $r=0$ 的简单情形, 即空间 V_h 是由分段常数构成的函数空间, 此时 (4.59) 式左端第 2 项为零, 而 (4.61) 则为

$$\frac{\mathrm{d}U_j}{\mathrm{d}t}-\frac{a}{h}(U_{j+1}-U_j)=0.$$

若将其中关于 t 的导数项用向前差商近似: $\frac{\mathrm{d}U_j}{\mathrm{d}t}\approx\frac{U_j^{n+1}-U_j^n}{\Delta t}$, 那么得到大家所熟悉的关于方程 (4.58) 的迎风差分格式

$$\frac{U_j^{n+1}-U_j^n}{\Delta t}-\frac{a}{h}(U_{j+1}^n-U_j^n)=0. \tag{4.62}$$

下面再来讨论间断 Galerkin 有限元法对于非线性双曲守恒律的推广.

考虑如下一维非线性守恒律的初值问题:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}+\dfrac{\partial f(u)}{\partial x}=0, & -\infty<x<\infty\ ,\ t>0,\\ u(x,0)=u^0(x)\ .\end{cases} \tag{4.63}$$

如前, 取定节点 $x_{j+\frac{1}{2}}=\frac{x_j+x_{j+1}}{2}$, $x_j=jh$, $I_j=[x_{j-\frac{1}{2}},x_{j+\frac{1}{2}}]$ 代表单元. V_h 仍然表示由次数 $\le r$ 的分段多项式构成的有限元空间. 这里, 目的是寻求问题 (4.63) 的近似解 $u_h(x,t)$, 对每个固定 t，$u_h(x,t)\in V_h$. 首先定义初值 $u_h(x,0)$，一个合理的选取是将 $u_h(x,0)$ 定义为函数 $u^0(x)$ 在空间 V_h 上的 L^2 投影, 此时 $u_h(x,0)$ 在 $I_j=(x_{j-\frac{1}{2}},x_{j+\frac{1}{2}})$ 上可由下式局部地定义

$$\int_{I_j}u_h(x,0)v_h(x)\,\mathrm{d}x=\int_{I_j}u^0(x)v_h(x)\,\mathrm{d}x\ ,\ \forall\ v_h\in V_h(I_j)\ . \tag{4.64}$$

当 $t>0$，为确定近似解 $u_h(x,t)$，类似于先前的作法将从如下积分方程出发去建立求解的计算格式:

$$\int_{I_j}\frac{\partial u_h}{\partial t}v_h\,\mathrm{d}x-\int_{I_j}f(u_h)(v_h)_x\,\mathrm{d}x +\widehat{f}(u_h)\ v_h\Big|_{x=x_{j-\frac{1}{2}}}^{x=x_{j+\frac{1}{2}}}=0, \tag{4.65}$$

$$\forall\ v_h\in V_h(I_j)\ .$$

在方程 (4.65) 中，右端两项属于在单元 I_j 内的积分，其含义是确定的，可以准确地或者借助数值积分公式计算它们．但是，此方程中的另外一项，由于函数 u_h 和 v_h 在端点 $x_{j\pm\frac{1}{2}}$ 处的间断性，所以它们在端点处如何取值是需要进一步确定的．这里，称 $\widehat{f}(u_h(\cdot,t))$ 为数值流通量．

在 [41][42](B.Kockburn & C.W.Shu, 1989) 中，借助积分方程 (4.65)，融入高分辨率有限差分法和有限体积法中如数值流动量、Riemann 解、 TVD 和限制器的思想、概念，提出了求解非线性双曲方程的一些新颖的计算格式，将间断有限元法成功地应用到非线性双曲守恒方程的求解问题．

关于积分方程 (4.65) 中边界值那一项的明确定义，其中 $v_h(\cdot,t)$ 为检验函数，所以 $v_h(x_{j\pm\frac{1}{2}},t)$ 取为 v_h 在 I_j 内侧的极限值，剩下只需给出数值流通量 $\widehat{f}(u_h)|_{x=x_{j\pm\frac{1}{2}}}$ 的定义即可．借助高分辨率差分格式的数值流通量的形式，可定义

$$\widehat{f}(u_h)(x_{j+\frac{1}{2}})=\widehat{f}(u_h^-(x_{j+\frac{1}{2}}),u_h^+(x_{j+\frac{1}{2}})) \tag{4.66}$$

其中

$$u_h^-(x_{j+\frac{1}{2}})=\lim_{x\to x_{j+\frac{1}{2}}^-}u_h(x)\ ,\qquad u_h^+(x_{j+\frac{1}{2}})=\lim_{x\to x_{j+\frac{1}{2}}^+}u_h(x)\ .$$

类似地，

$$\widehat{f}(u_h)(x_{j-\frac{1}{2}})=\widehat{f}(u_h^-(x_{j-\frac{1}{2}}),u_h^+(x_{j-\frac{1}{2}})). \tag{4.67}$$

这样一来，只要给定函数 $\widehat{f}(a,b):R^2\to R$，由方程 (4.65) 便可确定方程 (4.63) 的一个半离散近似．由此和由 (4.64) 给出的初值便可确定 $u_h(x,t)$ ，$t>0$．称 $\widehat{f}(a,b)$ 为数值流通量函数．

最后给出几个常用的数值流通量函数．

(1) Lax-Friedrichs 型：

$$\begin{aligned}&\widehat{f}^{LF}(a,b)=\frac{1}{2}[f(a)+f(b)-C(b-a)]\ ,\\&C=\max_{\inf u^0(x)\le s\le\sup u^0(x)}|f'(s)|\ .\end{aligned} \tag{4.68}$$

(2) Engquist-Osher 型：

$$\widehat{f}(a,b)=\int_0^b\min(f'(s),0)\,\mathrm{d}s+\int_0^a\max(f'(s),0)\,\mathrm{d}s+f(0)\ . \tag{4.69}$$

(3) Godunov 型：

$$\widehat{f}^G(a,b)=\begin{cases}\displaystyle\min_{a\le u\le b}f(u)\ , & a\le b\ ,\\ \displaystyle\max_{a\ge u\ge b}f(u)\ , & a\ge b\ .\end{cases} \tag{4.70}$$

至此完成了问题 (4.63) 的间断 Galerkin 空间离散化．类似于前面讨论过的线性问题 ($f(u)=-au$)，借助空间 $V_h(I_j)$ 的基函数可将 (4.65) 写成常微分方程组的形式，其中质量矩阵 M 是一个低阶的非奇异矩阵，逆矩阵 M^{-1} 可通过符号运算或手算求出，最后所得常微分方程组可表示为

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}U_h}{\mathrm{d}t}=L_h(U_h), \qquad t>0, \\ U_h(x,0)=P_0u^0(x)\in V_h, \end{cases} \tag{4.71}$$

其中 P_0 表示在子空间 S_h 上的 L^2- 投影算子，$L_h(U_h)$ 是间断 Galerkin 空间离散中对于 $-\partial_x f(u)$ 所生成的一个逼近．

关于半离散问题 (4.71) 的求解，[41] 和 [42] 中建议采用如下 k- 级显型 Runge-Kutta 方法，其计算步骤与公式为：

1. 令 $u_h^{(0)}=u_h^n$；
2. 对 $i=1,2,\cdots,k$，有

$$u_h^{(i)}=\sum_{l=1}^{i-1}\alpha_{il}u_h^{(l)}+\beta_{il}\triangle tL_h(u_h^{(l)});$$

3. 令 $u_h^{n+1}=u_h^{(k)}$，

其中 α_{il},β_{il} 为非负系数．这种方法属于向前 Euler 方法的凸组合．通过对于线性模型 $f(u)=cu$ 的分析，可以得到上述全离散格式的 Von Neumann 条件 (L^2 稳定的必要条件) 是：

$$|c|\frac{\triangle t}{\triangle x}\le CFL\approx\frac{1}{2k-1}.$$

对于 $k=2$ 和 $k=3$ 情形上述 Runge-Kutta 方法的系数分别为：

$$(\alpha_{il})=\begin{bmatrix}1 & \\ \dfrac{1}{2} & \dfrac{1}{2}\end{bmatrix},\ (\beta_{il})=\begin{bmatrix}1 & \\ 0 & \dfrac{1}{2}\end{bmatrix}$$

和

$$(\alpha_{il})=\begin{bmatrix}1 & & \\ \dfrac{3}{4} & \dfrac{1}{4} & \\ \dfrac{1}{3} & 0 & \dfrac{2}{3}\end{bmatrix},\ (\beta_{il})=\begin{bmatrix}1 & & \\ 0 & \dfrac{1}{4} & \\ 0 & 0 & \dfrac{2}{3}\end{bmatrix},$$

它们分别属于二阶和三阶精度显型格式．

对于非线性守恒律的间断解 (如激波) 的计算，实践表明，在计算格式中引入坡度限制器对加强稳定性、控制伪振荡有很好的效果．下面介绍一下坡度限制器

$\Lambda\Pi_h$ 的具体作法. 令 $u_h = \Lambda\Pi_h v_h$, 对于分段线性函数 v_h:

$$v_h|_{I_j} = \overline{v}_j + (x - x_j)v_{x,j}$$

其中 $\overline{v}_j$ 代表 v_h 在 $I_j = [x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}]$ 上的平均值. van Lee[49] 在其 MUSCL 格式中引入了如下坡度限制器

$$u_h|_{I_j} = \overline{v}_j + (x - x_j)m\left(v_{x,j}, \frac{\overline{v}_{j+1} - \overline{v}_j}{\Delta_j}, \frac{\overline{v}_j - \overline{v}_{j-1}}{\Delta_j}\right), \tag{4.72}$$

其中 $\Delta_j = x_{j+\frac{1}{2}} - x_{j-\frac{1}{2}}$, minmode 函数 m 定义为

$$m(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \begin{cases} S \min\limits_{n=1,2,3} |\alpha_n|, & \text{当}\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\text{同符号}, \\ 0, & \text{否则}, \end{cases} \tag{4.73}$$

其中 $S = \text{sign}(\alpha_1) = \text{sign}(\alpha_2) = \text{sign}(\alpha_3)$. 后来, Osher[50] 给出了如下修正的坡度限制器 $\Lambda\Pi_h^1$, 即令

$$u_h|_{I_j} = \overline{v}_j + (x - x_j)m\left(v_{x,j}, \frac{v_{j+1} - v_j}{\Delta_j/2}, \frac{v_j - v_{j-1}}{\Delta_j/2}\right),$$

此式又可改写为:

$$u^-_{h,j+\frac{1}{2}} = \overline{v}_j + m\left(v^-_{j+\frac{1}{2}} - \overline{v}_j, \overline{v}_{j+1} - \overline{v}_j, \overline{v}_j - \overline{v}_{j-1}\right), \tag{4.74}$$

$$u^+_{h,j-\frac{1}{2}} = \overline{v}_j - m\left(\overline{v}_j - v^+_{j-\frac{1}{2}}, \overline{v}_{j+1} - \overline{v}_j, \overline{v}_j - \overline{v}_{j-1}\right). \tag{4.75}$$

对于一般的函数 v_h, 令 v_h^1 为函数 v_h 在分段线性函数空间上的 L^2 投影, 那么在区间 I_j 上这样来定义 $u_h = \Lambda\Pi_h v_h$:

(1) 利用 (4.74) 和 (4.75) 计算 $u^-_{j+\frac{1}{2}}$ 和 $u^+_{j-\frac{1}{2}}$;

(2) 如果 $u^-_{j+\frac{1}{2}} = v^-_{j+\frac{1}{2}}$ 且 $u^+_{j-\frac{1}{2}} = v^+_{j-\frac{1}{2}}$, 则令 $u_h|_{I_j} = v_h|_{I_j}$;

(3) 否则, 令 $u_h = \Lambda\Pi_h^1(v_h^1)$.

上述限制器是利用局部平均总变差来设计的, 称作 TVD 型限制器, 它在远离极值点的地方能保持近似解 v_h 的原始精度, 但是在极值点 (v_h 的一阶导数为零的点) 附近会失去精度. 为了某种程度上弥补这一缺陷, 文献 [51] 建议采用一种修正的 minmode 函数 $\overline{m}$ 代替一般坡度限制器中的函数 m, 即

$$\overline{m}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \begin{cases} \alpha_1, & \text{当}|\alpha_1| \le M\Delta_j^2, \\ m(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3), & \text{否则}, \end{cases}$$

其中 M 是函数 v_h 于局部极值点处的二阶导数的上界.

第五章　谱与拟谱方法

谱与拟谱方法是以三角多项式 (或其他正交多项式) 为基函数的 Galerkin 方法或配置法. 这一历史悠久的数值解法, 在快速 Fourier 变换出现 (1965) 之后获得迅速的发展, 成为近似求解偏微分方程的重要方法之一. 谱方法的最大魅力是它具有所谓“无穷阶”的收敛性, 即如果原方程的解无限光滑, 那么用适当的谱方法求得的近似解将以 N^{-1} 的任意次幂速度收敛于精确解, 这里 N 是所选取的基函数的个数. 此方法已广泛应用于物理、力学、大气、海洋等领域的科学计算, 其数值分析理论也基本上趋于完善 (参看 [60] 、[61]). 在本章中, §5.1 介绍投影与插值算子及其逼近性质, 这是谱与拟谱方法的基础; §5.2 以热传导方程的初边值问题为例, 介绍谱与拟谱方法及其理论误差估计; §5.3 介绍谱 (拟谱) 方法对两个一阶偏微问题的应用; §5.4 介绍离散 Fourier 变换的快速算法.

§5.1　投影与插值算子的逼近性质

Fourier(三角多项式) 逼近

设 $S_N = \mathrm{span}\{e^{ikx}, -N \le k \le N-1\}$, $i=\sqrt{-1}$. 则 S_N 为次数 $\le N$ 的三角多项式所构成的函数空间, 其维数是 $2N$. 用 $L_p^2(0,2\pi)$ 表示由 2π- 周期函数构成的复 L^2- 空间, 其中内积和范数为

$$\begin{aligned}(u,v) &= \int_0^{2\pi} u(x)\overline{v(x)}\mathrm{d}x,\ \forall u,v\in L_p^2(0,2\pi),\\ \|u\| &= (u,u)^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}$$

对任意 $u\in L_p^2(0,2\pi)$, 存在 $P_N u\in S_N$ 使得

$$(P_N u, v) = (u,v),\quad \forall v\in S_N, \tag{5.1}$$

称 $P_N u$ 为 u 的 Fourier 投影, 算子 $P_N: L_p^2(0,2\pi)\to S_N$ 称为 Fourier 投影算子. 由函数系 $\{e^{ikx}\}$ 的正交性: $(e^{ikx}, e^{ik'x}) = \delta_{kk'}$, 如果 $u=\sum\limits_{k=-\infty}^{+\infty}\widehat{u}_k\phi_k(x)$, 则 $P_N u = \sum\limits_{k=-N}^{N-1}\widehat{u}_k\phi_k(x)$, 其中 $\phi_k(x)=e^{ikx}$, 这表明 Fourier 投影 $P_N u$ 实际上就是 u 的 Fourier 展开的截断.

在讨论 Fourier 投影的逼近性质之前, 需要介绍一下关于周期函数 Sobolev 空间中范数的两种定义及其等价性. 对非负整数 m, 记号 $H_p^m(0,2\pi)$ 代表无穷次可微 2π 周期函数类 $C_p^\infty(0,2\pi)$ 按 $H^m(0,2\pi)$ 的范数完备化所得到的函数空间, 显然它

是 $H^m(0,2\pi)$ 的子空间. 对于 $u\in H_p^m(0,2\pi)$, 它在 Sobolev 空间 $H^m(0,2\pi)$ 中的范数为

$$\|u\|_{H^m(0,2\pi)}=\left\{\sum_{k=0}^{m}\int_0^{2\pi}|u^{(k)}(x)|^2\mathrm{d}x\right\}^{\frac{1}{2}},\tag{5.2}$$

$u^{(k)}$代表 u 的 k 阶广义导数.

此外, 利用 u 的 Fourier 系数 $\{\widehat{u}_k\}$ 又可引进如下范数 (应用更加方便的一种):

$$\|u\|_m=\left\{\sum_{k=-\infty}^{+\infty}(1+|k|^2)^m|\widehat{u}_k|^2\right\}^{\frac{1}{2}}.\tag{5.3}$$

由于 $(e^{ikx})'=ike^{ikx}$, 并注意到

$$\frac{1}{2^m}(1+|k|^2)^m\le|k|^{2m}\le(1+|k|^2)^m,\ \forall\ \text{整数}\ k\ne0,$$

不难证明: 存在不依赖于 u 的正常数 C_1 和 C_2, 使得

$$C_1\|u\|_{H^m(0,2\pi)}\le\|u\|_m\le C_2\|u\|_{H^m(0,2\pi)}\tag{5.4}$$

这表明范数 $\|\cdot\|_m$ 和 $\|\cdot\|_{H^m(0,2\pi)}$ 在 $H_p^m(0,2\pi)$ 中是等价的. 利用 (5.3), 对于一般的实数 $\mu\ge0$, 可定义空间 $H_p^\mu(0,2\pi)$, 其中的范数和半范数分别地定义为

$$\begin{aligned}\|u\|_\mu&=\left(\sum_{k=-\infty}^{+\infty}(1+|k|^2)^\mu|\widehat{u}_k|^2\right)^{\frac{1}{2}},\\|u|_\mu&=\left(\sum_{k=-\infty}^{+\infty}|k|^{2\mu}|\widehat{u}_k|^2\right)^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}\tag{5.5}$$

对于 $u\in H_p^1(0,2\pi)$, 因 $\mathrm{d}u/\mathrm{d}x=\sum\limits_{k=-\infty}^{+\infty}ik\widehat{u}_ke^{ikx}$, 可见 $\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ 和 P_N 是可交换的, 即有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(P_Nu)=P_N\Big(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\Big).\tag{5.6}$$

定理 5.1 *对任意 $0\le\mu\le\sigma$, 存在常数 C 使得*

$$\|u-P_Nu\|_\mu\le CN^{\mu-\sigma}|u|_\sigma,\quad\forall u\in H_p^\sigma(0,2\pi).\tag{5.7}$$

证明 设 $0\le\mu\le\sigma$, 则有

$$\begin{aligned}\|u-P_Nu\|_\mu^2&=\sum_{|k|\ge N}(1+|k|^2)^\mu|\widehat{u}_k|^2\\&\le2^\mu\sum_{|k|\ge N}|k|^{2\sigma-2(\sigma-\mu)}|\widehat{u}_k|^2\le2^\mu N^{2(\mu-\sigma)}|u|_\sigma.\end{aligned}$$

引理 5.1 (逆不等式) 对任意 $0 \le \mu \le \nu$, 有

$$|v_N|_\nu \le N^{\nu-\mu}|v_N|_\mu, \quad \forall v_N \in S_N. \tag{5.8}$$

它的证明与定理 5.1 类似. 根据引理 5.1, 也有 $\|v_N\|_\nu \le CN^{\nu-\mu}\|v_N\|_\mu$, $\forall v_N \in S_N$.

再来讨论 Fourier 插值算子.

设 $x_j = jh$, $j = 0, 1, \cdots, 2N-1$, $h = \pi/N$, 对于 $u \in C^0([0, 2\pi])$, 如果 $I_N u \in S_N$ 满足

$$I_N u(x_j) = u(x_j), \quad j = 0, 1, \cdots, 2N-1, \tag{5.9}$$

则称它为 u 的 Fourier 插值, $I_N : C^0([0, 2\pi]) \to S_N$ 称为 Fourier 插值算子.

引进如下离散内积与范数

$$\begin{aligned} &(u, v)_h = h \sum_{j=0}^{2N-1} u(x_j)\overline{v(x_j)}, \quad h = \frac{2\pi}{2N} \\ &\|u\|_h = (u, u)_h^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{5.10}$$

不难验证 Fourier 插值算子的下列性质:

(i) 若 $I_N u = \sum_{k=-N}^{N-1} \widetilde{u_k}\phi_k(x)$, 则 $\widetilde{u_k} = (u, \phi_k)_h$; (5.11)

(ii) $I_N v = v, \quad \forall v \in S_N$;

(iii) $(I_N u, I_N w) = (u, w)_h = \sum_{k=-N}^{N-1} \widetilde{u_k} \cdot \overline{\widetilde{w_k}}$; (5.12)

(iv) $\|I_N(uw)\| \le \|u\|_{L^\infty} \|I_N w\|$. (5.13)

此外, 尚有如下混迭 (aliasing) 公式

$$\widetilde{u_k} = \widehat{u}_k + \sum_{\substack{j=-\infty \\ j\ne 0}}^{+\infty} \widehat{u}_{k+j2N}, \quad -N \le k \le N-1, \tag{5.14}$$

(以上内容可参看 [61], 第三章).

定理 5.2 设 $0 \le l \le m$, $m > \dfrac{1}{2}$, 则对任意 $u \in H_p^m(0, 2\pi)$, 存在与 u 和 N 无关的常数 C 允许依赖于 m, 使得

$$\|u - I_N u\|_l \le CN^{-m+l}|u|_m. \tag{5.15}$$

证明 设 $u(x)=\sum_{k=-\infty}^{+\infty}\hat{u}_k e^{ikx}$, 由混迭公式可知

$$I_N u(x)=\sum_{|k|\le N}\hat{u}_k e^{ikx}+\sum_{|k|\le N}\left(\sum_{\substack{s=-\infty\\ s\ne 0}}^{+\infty}\hat{u}_{k+2sN}\right)e^{ikx},$$

从而有

$$u(x)-I_N u(x)=\sum_{|k|>N}\hat{u}_k e^{ikx}-\sum_{|k|\le N}\left(\sum_{\substack{s=-\infty\\ s\ne 0}}^{+\infty}\hat{u}_{k+2sN}\right)e^{ikx}$$

和

$$\begin{aligned}\|u(x)-I_N u(x)\|_l^2\le&\sum_{|k|>N}(1+|k|^2)^l|\tilde{u}_k|^2+\\&\sum_{|k|\le N}(1+|k|^2)^l\left|\sum_{\substack{s=-\infty\\ s\ne 0}}^{+\infty}\hat{u}_{k+2sN}\right|^2.\end{aligned}\tag{5.16}$$

关于 (5.16) 右端的第一项, 易知

$$\begin{aligned}\sum_{|k|>N}(1+|k|^2)^l|\hat{u}_k|^2&\le CN^{2(l-m)}\sum_{|k|>N}(1+|k|^2)^m|\hat{u}_k|^2\\&\le CN^{2(l-m)}\sum_{|k|>N}|k|^{2m}|\hat{u}_k|^2\\&\le CN^{2(l-m)}|u|_m^2.\end{aligned}$$

下面来估计 (5.16) 右端的第二项. 首先, 由 Cauchy 不等式

$$\begin{aligned}\left|\sum_{\substack{s=-\infty\\ s\ne 0}}^{+\infty}\hat{u}_{k+2sN}\right|^2\le&\left\{\sum_{\substack{s=-\infty\\ s\ne 0}}^{+\infty}(1+|k+2sN|^2)^{-m}\right\}\cdot\\&\left\{\sum_{\substack{s=-\infty\\ s\ne 0}}^{+\infty}(1+|k+2sN|^2)^{m}|u_{k+2sN}|^2\right\}.\end{aligned}$$

注意, 当 $|k|\le N$ 和 $s>0$ 时, 因 $k+2sN\ge(2s-1)N$, 故知 $(1+|k+2sN|^2)^{-m}\le(1+((2s-1)N)^2)^{-m}\le((2s-1)N)^{-2m}$, 于是有

$$\sum_{s=1}^{+\infty}(1+|k+2sN|^2)^{-m}\le N^{-2m}\sum_{s=1}^{+\infty}(2s-1)^{-2m}.$$

已知，当 $m > \frac{1}{2}$ 时，$\sum_{s=1}^{+\infty}(2s-1)^{-2m}$ 为收敛级数，它是一个常数．再对 $|k| \le N$ 和 $s < 0$ 的情形进行类似的讨论，即可证明：

$$\sum_{\substack{s=-\infty \\ s\neq 0}}^{+\infty} (1+|k+2sN|^2)^{-m} \le CN^{-2m}.$$

这样一来，可以得到

$$\begin{aligned}
&\sum_{|k|\le N} (1+|k|^2)^l \left| \sum_{\substack{s=-\infty \\ s\neq 0}}^{+\infty} \hat{u}_{k+2sN} \right|^2 \\
&\le CN^{2(l-m)} \sum_{|k|\le N} \sum_{\substack{s=-\infty \\ s\neq 0}}^{+\infty} (1+|k+2sN|^2)^m \left|\hat{u}_{k+2sN}\right|^2 \\
&\le CN^{2(l-m)} \sum_{|k|\le N} \sum_{\substack{s=-\infty \\ s\neq 0}}^{+\infty} |k+2sN|^{2m} |\hat{u}_{k+2sN}|^2 \\
&\le CN^{2(l-m)} |u|_m^2
\end{aligned}$$

此即 (5.16) 右端第二项的估计式．至此，定理 5.2 证毕．

Chebyshev 多项式逼近

作为 Fourier(三角多项式) 逼近的一个重要补充，下面介绍 Chebyshev 多项式逼近，它对于求解非周期边值问题有特殊的用途．

Chebyshev (第一类) 多项式为

$$T_k(x) = \cos(k\arccos^{-1} x), \quad -1 \le x \le 1 \\ k = 0, 1, \cdots. \tag{5.17}$$

这里，$T_0(x) = 1$，$T_1(x) = x$，$T_2(x) = 2x^2 - 1, \cdots$．利用变换 $x = \cos\theta$ 和公式

$$\cos(k+1)\theta + \cos(k-1)\theta = 2\cos\theta\cos k\theta$$

可得如下递推关系式

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \cdots.$$

已知，$\{T_k(x)\}$ 是区间 $[-1,1]$ 上以 $\omega(x) = (1-x^2)^{-\frac{1}{2}}$ 为权的正交函数系．事

实上，若令 $x=\cos\theta$, 则有

$$\int_{-1}^{1} T_n(x)T_m(x)\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\mathrm{d}x = \int_0^{\pi}\cos n\theta\cos m\theta\mathrm{d}\theta = \begin{cases} 0, & m\neq n, \\ \frac{\pi}{2}, & m=n>0, \\ \pi, & m=n=0. \end{cases}$$

因为 $T_k(x)=(-1)^k T_k(-x)$, 故知：当 k 为偶数时，$T_k(x)$ 是偶函数，而当 k 为奇数时，$T_k(x)$ 是奇函数. 另外，$T_k(x)$ 具有以下常用性质：

$$\begin{aligned} &|T_k(x)|\le 1, && x\in[-1,1], \\ &T_k(\pm 1)=(\pm 1)^k, && \text{当}\quad k\geqslant 1\text{时}, \\ &|T_k'(x)|\le k^2, && x\in[-1,1], \\ &T_k'(\pm 1)=(\pm 1)^k k^2, && \end{aligned}$$

并有表达式

$$T_k(x)=\frac{k}{2}\sum_{j=0}^{[\frac{k}{2}]}(-1)^j\frac{(k-j-1)!}{j!(k-2j)!}(2x)^{k-2j},\quad k\ge 1.$$

讨论 Chebyshev 逼近问题，需要借助带权的 Sobolev 空间. 记 $H_\omega^m(-1,1)=H_\omega^m(I)$ 为以 $\omega(x)=(1-x^2)^{-\frac{1}{2}}$ 为权的 m 阶 Sobolev 空间，其内积和范数分别定义为

$$(u,v)_{m,\omega}=\sum_{k=0}^{m}\int_I u^{(k)}(x)v^{(k)}(x)\omega(x)\mathrm{d}x,$$

$$\|u\|_{m,\omega}=(u,u)_{m,\omega}^{\frac{1}{2}}.$$

而记 $L_\omega^p(I)$ 的范数为

$$\|u\|_{L_\omega^p(I)}=\left(\int_I |u(x)|^p\omega(x)\mathrm{d}x\right)^{\frac{1}{p}}, 1\le p<+\infty.$$

当 $p=\infty$ 时，

$$\|u\|_{L_\omega^\infty(I)}=\operatorname*{ess\,sup}_{x\in I}|u(x)|.$$

可以证明，$H_\omega^m(I)$ 为 Hilbert 空间，而 $L_\omega^p(I)$, $1\le p<+\infty, p\neq 2$ 为 Banach 空间. 这里 $H_\omega^0(I)=L_\omega^2(I)$, $\{T_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$ 构成空间 $L_\omega^2(I)$ 的一个完备的正交基底. 简记 $(\cdot,\cdot)_{0,\omega}=(\cdot,\cdot)_\omega$, $\|\cdot\|_{0,\omega}=\|\cdot\|_\omega$.

设 $u(x)\in L^2_\omega(I)$，它的 Chebyshev 展开为 $u(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\hat{u}^c_kT_k(x)$，其中 $\hat{u}^c_k=\frac{2}{\pi c_k}\int_{-1}^{1}u(x)T_k(x)\omega(x)\mathrm{d}x$，$c_0=2$，$c_k=1$当$k\geqslant 1$. 不难证明

$$\|u(x)\|^2_\omega=\frac{\pi}{2}\sum_{k=0}^{\infty}c_k|\hat{u}^c_k|^2.$$

令 $P^c_Nu(x)=\sum_{k=0}^{N}\hat{u}^c_kT_k(x)$，即 P^c_Nu 为 u 的 Chebyshev 展式的 N 阶截断. 设 $\mathbf{P}_N$ 代表所有次数 $\leq N$ 的多项式构成的空间，则 $P^c_Nu\in\mathbf{P}_N$ 满足

$$(P^c_Nu,v)_\omega=(u,v)_\omega,\qquad\forall v\in\mathbf{P}_N.\tag{5.18}$$

换句话说，P^c_Nu 为函数 u 在 $\mathbf{P}_N$ 上按 $L^2_\omega(I)$ 中内积的正交投影，并称 $P^c_N:L^2_\omega(I)\to\mathbf{P}_N$ 为 Chebyshev 投影算子.

定理 5.3 *设 $u\in H^m_\omega(I), m\geqslant 0, P^c_Nu$ 为 u 的 Chebyshev 展式的 N 阶截断，则*

$$\|u-P^c_Nu\|_\omega\leq CN^{-m}\|u\|_{m,\omega},\tag{5.19}$$

其中 C 是与 N 和 u 无关的常数.

证明 利用变换 $x=\cos\theta$，并令 $u^*(\theta)=u(\cos\theta),0\leq\theta\leq 2\pi$，则可在 $L^2_\omega(I)$ 和 $L^2_p(0,2\pi)$ 中的偶实函数之间建立同构 $u\leftrightarrow u^*$，此同构还可扩展到 $H^m_\omega(I)$ 和 $H^m_p(0,2\pi)$ 之间. 由于 $\left|\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\theta}\right|=|-\sin\theta|\leq 1$，所以有

$$\|u^*\|_{H^m(0,2\pi)}\leq C\|u\|_{m,\omega}.\tag{5.20}$$

仍用 P_N 表示 Fourier 投影算子，即

$$P_N\left(\sum_{k=-\infty}^{+\infty}\hat{v}_ke^{ik\theta}\right)=\sum_{k=-N}^{N-1}\hat{v}_ke^{ik\theta}.$$

不难看出： $(P^c_Nu)^*=P_Nu^*, \forall u\in L^2_\omega(I)$. 那么由定理 5.1 和 (5.20) 可得

$$\begin{aligned}\|u-P^c_Nu\|_\omega&=\frac{1}{\sqrt{2}}\|u^*-P_Nu^*\|_{L^2(0,2\pi)}\\&\leq CN^{-m}\|u\|_{m,\omega},\end{aligned}$$

定理得证.

上面利用 $L^2_\omega(I)$ 与周期函数空间 $L^2_p(0,2\pi)$ 的同构关系得 Chebyshev 投影误差的 $L^2_\omega(I)$- 范数估计，此估计与 Fourier 投影的误差估计是同等的. 然而对于 $u-P^c_Nu$

的 $H^l_\omega(I)$- 范数估计则要复杂得多，结果 (即误差阶) 也不如 Fourier 投影的相应结果好．这里，仅引述如下结果 (证明和进一步讨论见 [61])．

定理 5.4 设 $m \geq 1, 0 \leq l \leq m$, 则对任意 $u \in H^m_\omega(I)$, 有

$$\|u - P^c_N u\|_{l,\omega} \leq \begin{cases} CN^{-\frac{1}{2}}N^{2l-m}\|u\|_{m,\omega}, & l \geq 1, \\ CN^{\frac{3l}{2}-m}\|u\|_{m,\omega}, & 0 \leq l \leq 1. \end{cases} \tag{5.21}$$

最后介绍一下 Chebyshev 插值逼近.

设 $u(x) \in C^0[-1,1]$, $I_N u(x)$ 代表以 $x_j = \cos\dfrac{j\pi}{N}, j = 0,1,\cdots,N$ 为插值节点的 N 次插值多项式，即满足：$I^c_N u(x_j) = u(x_j), j = 0,1,\cdots,N$. 由于 $\{x_j\}$ 互异，故 $I^c_N u(x)$ 存在并且惟一．将 $I^c_N u(x)$ 表示为

$$I^c_N u(x) = \sum_{k=0}^{N} \widetilde{u}^c_k T_k(x) \tag{5.22}$$

称此为函数 $u(x)$ 的 N 次 Chebyshev 插值多项式．显然，

$$u(x_j) = \sum_{k=0}^{N} \widetilde{u}^c_k T_k(x_j) \tag{5.23}$$

其中系数 $\{\widetilde{u}^c_k\}$ 称为 $\{u(x_j)\}$ 的离散 Chebyshev 变换.

对于任意 $u, v \in C[-1,1]$, 定义离散内积及范数

$$(u,v)_N = \sum_{k=0}^{N} u(x_j)v(x_j)w_j, \quad \|u\|_N = (u,u)^{\frac{1}{2}}_N \tag{5.24}$$

其中 $w_0 = \dfrac{\pi}{2N}, w_j = \dfrac{\pi}{N}, 1 \leq j \leq N$. 注意，上述 $x_j = \cos\dfrac{j\pi}{N}$ 和 w_j $(j = 0,1,\cdots,N)$ 恰好是 Gauss-Lobatto 求积公式的节点和权系数，该求积公式具有性质：对任意 $p(x) \in \mathbf{P}_{2N-1}$,

$$\sum_{j=0}^{N} p(x_j)w_j = \int_{-1}^{1} p(x)\omega(x)\mathrm{d}x. \tag{5.25}$$

下面给出求 $\widetilde{u}^c_k$ 的计算公式．由 (5.23) 有

$$\begin{aligned}\sum_{j=0}^{N} u(x_j)T_s(x_j)\omega_j &= \sum_{j=0}^{N}\sum_{k=0}^{N} \widetilde{u}^c_k T_k(x_j)T_s(x_j)\omega_j \\ &= \sum_{k=0}^{N} \widetilde{u}^c_k \sum_{j=0}^{N} T_k(x_j)T_s(x_j)\omega_j.\end{aligned}$$

当 $k+s \le 2N-1$ 时，由 (5.25) 知

$$\begin{aligned}\sum_{j=0}^{N} T_k(x_j)T_s(x_j)\omega_j &= \int_{-1}^{1} T_k(x)T_s(x)\omega(x)\mathrm{d}x \\ &= \delta_{ks}\int_{-1}^{1} T_k^2(x)\omega(x)\mathrm{d}x \\ &= \delta_{ks}\sum_{j=0}^{N}(T_k(x_j))^2\omega_j \\ &= \delta_{ks}r_k,\end{aligned}$$

而当 $k+s=2N$ 即 $k=s=N$ 时，

$$\sum_{j=0}^{N} T_k(x_j)T_s(x_j)\omega_j = \sum_{j=0}^{N}(T_N(x_j))^2\omega_j = r_N.$$

这样一来，我们得到

$$\widetilde{u}_k^c = (u, T_k)_N = \frac{1}{r_k}\sum_{j=0}^{N} u(x_j)T_k(x_j)\omega_j, \tag{5.26}$$

其中 $r_k = \sum\limits_{j=0}^{N}(T_k(x_j))^2\omega_j$.

(5.23) 和 (5.26) 给出了 $\{u(x_j)\}_{j=0}^{N}$ 与 $\{\widetilde{u}_k^c\}_{k=0}^{N}$ 之间的转换关系. 此外，关于插值系数 $\widetilde{u}_k^c$ 亦有下述混迭公式

$$\widetilde{u}_k^c = \hat{u}_k^c + \frac{1}{r_k}\sum_{l>N}(T_l, T_k)_N\hat{u}_k^c. \tag{5.27}$$

这些特征都与 Fourier 插值的情况十分类似.

关于 Chebyshev 插值的误差估计有如下结果.

定理 5.5 设 $u \in H_\omega^\sigma(I), \sigma \ge 1$, 则有

$$\|u - I_N^c u\|_{l,\omega} \le CN^{2l-\sigma}\|u\|_{\sigma,\omega}, \quad 0 \le l \le \sigma. \tag{5.28}$$

作为本节的结尾，介绍一下多项式的逆不等式.

定理 5.6 对任意 $\phi \in \mathbf{P}_N$, 有

$$\|\phi\|_{L_\omega^q(I)} \le CN^{\frac{1}{p}-\frac{1}{q}}\|\phi\|_{L_\omega^p(I)}, \text{ 当 } \quad 1 \le p \le q \le +\infty \tag{5.29}$$

和

$$\|\phi^{(r)}\|_{L_\omega^p(I)} \le CN^{2r}\|\phi\|_{L_\omega^p(I)}, \text{ 当 } \quad r \ge 1,\ 2 \le p \le +\infty. \tag{5.30}$$

§5.2 谱与拟谱方法

本节以热传导方程的初边值问题为例介绍谱与拟谱方法，包括用 Chebyshev 配置法求解非周期边值条件的问题. 这些方法都是用于空间变量的离散化，即构造问题的半离散近似，至于时间变量的进一步离散化可沿用第二章已介绍的方法.

Fourier-Galerkin 方法 (谱方法)

这里，考虑热传导方程的周期初值问题：

$$\begin{cases} u_t - u_{xx} = f(x,t), & 0 < x < 2\pi,\ 0 < t \le T, \\ u(0,t) = u(2\pi,t), & 0 < t \le T, \\ u(x,0) = u^0(x), & 0 < x < 2\pi, \end{cases} \tag{5.31}$$

其中 $f(\cdot,t), u^0(\cdot) \in L_p^2(0,2\pi)$. 由第一章定理 1.1 可知，当 $u^0 \in H_p^s(0,2\pi)$ 和 $f \in L^2(0,T;H_p^s(0,2\pi))$ 时，初值问题 (5.31) 存在惟一解 $u(x,t)$, 满足

$$u \in L^2(0,T;H_p^{s+2}(0,2\pi)), \quad u_t \in L^2(0,T;H_p^s(0,2\pi)).$$

设 S_N=Span$\{e^{ikx} : -N \le k \le N-1\}$, 则问题 (5.31) 的 Fourier-Galerkin 近似为求 $u_N(t) \in S_N$, 使得

$$\begin{cases} ((u_N)_t - (u_N)_{xx} - f, v) = 0,\ \forall v \in S_N, 0 < t \le T, \\ u_N(0) = P_N u^0. \end{cases} \tag{5.32}$$

若令 $u_N(x,t) = \sum\limits_{k=-N}^{N-1} C_k(t)e^{ikx}$, 将它代入 (5.32) 并取 $v = e^{ikx}$, 由 $\{e^{ilx}\}_{l=-N}^{N-1}$ 的正交性可得

$$\begin{cases} \dot{C}_k(t) + k^2 C_k(t) - \hat{f}_k(t) = 0, & 0 < t \le T, \\ C_k(0) = \hat{(u^0)}_k, & -N \le k \le N-1. \end{cases} \tag{5.33}$$

它是一个以 $\{C_k(t)\}_{k=-N}^{N-1}$ 为未知函数的一阶线性常微分方程组，其中 $\hat{f}_k(t)$ 和 $\hat{(u^0)}_k$ 分别为 $f(\cdot,t)$ 和 $u^0(\cdot)$ 的 Fourier 系数. 由 (5.33) 求出系数 $\{C_k(t)\}_{k=-N}^{N-1}$ 后，便可得到问题 (5.31) 的近似解 $u_N(x,t)$.

再来讨论一下近似解 $u_N(x,t)$ 与问题的精确解 $u(x,t)$ 之间的误差. 设 $u_N - P_N u = \theta, P_N u - u = \rho$, 则 θ 满足

$$(\theta_t, v) + (\theta_x, v_x) = (\rho_t - \rho_{xx}, v), \quad \forall v \in S_N. \tag{5.34}$$

注意到 ρ_t 和 ρ_{xx} 与 S_N 正交，故上式右端为零，于是若令 $v = \theta$ 可得

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\theta(t)\|^2 + \|\theta_x(t)\|^2 = 0,$$

再由两端对 t 积分，则得

$$\|\theta(t)\|^2 + 2\int_0^t \|\theta_x(\tau)\| \mathrm{d}\tau = \|\theta(0)\|^2.$$

由于 $\theta(0) = u_N(0) - P_N u^0 = 0$, 上式表明 $\|\theta(t)\| = 0$, 对所有 $t \geqslant 0$. 这样一来，由 $P_N u$ 的逼近性质有

$$\begin{aligned} \|u_N(\cdot,t) - u(\cdot,t)\| &\le \|\rho(t)\| + \|\theta(t)\| = \|\rho(t)\| \\ &= \|u(t) - P_N u(t)\| \le CN^{-m}\|u(t)\|_m. \end{aligned} \tag{5.35}$$

此式给出了 Fourier-Galerkin 近似解按 $L^2(0,2\pi)$-范数的误差估计.

Fourier 配置法 (拟谱方法)

仍以问题 (5.31) 为例. 在区间 $[0,2\pi]$ 上选取节点 (配置点) $x_j = jh$, $j = 0, 1, \cdots, 2N-1$, 其中 $h = \dfrac{2\pi}{2N}$. 那么求解 (5.31) 的 Fourier 配置法为求 $u_N(\cdot,t) \in S_N$, 使得

$$\begin{cases} ((u_N)_t - (u_N)_{xx} - f)(x_j,t) = 0, \ 0 < t \le T, \\ u_N(x_j,0) = u^0(x_j), \ j = 0,1,\cdots,2N-1, \end{cases} \tag{5.36}$$

此即要求近似解 $u_N(x,t)$ 在各个配置点处满足方程和初值条件. 利用离散内积

$$(u,v)_h = h\sum_{j=0}^{2N-1} u(x_j)v(x_j),$$

定义式 (5.36) 又可改写为

$$\begin{cases} ((u_N)_t - (u_N)_{xx} - f, v)_h = 0, \ \forall v \in S_N, 0 < t \le T, \\ u_N(x,0) = I_N u^0(x). \end{cases} \tag{5.37}$$

若令 $u_N(x,t) = \sum\limits_{k=-N}^{N-1} \widetilde{u}_{N,k}(t)e^{ikx}$, 其中

$$\widetilde{u}_{N,k}(t) = (u_N, e^{ikx})_h = h\sum_{j=0}^{2N-1} u_N(x_j,t)e^{-ikx_j}, \tag{5.38}$$

则有

$$u_N(x_j,t) = \sum_{k=-N}^{N-1} \widetilde{u}_{N,k}(t)e^{ikx_j} \tag{5.39}$$

和

$$(u_N)_{xx}(x_j,t) = -\sum_{k=-N}^{N-1} k^2\widetilde{u}_{N,k}(t)e^{ikx_j}. \tag{5.40}$$

将 u_N 和 $(u_N)_{xx}$ 的上述表示式代入 (5.37), 可得

$$\begin{cases} \dot{\widetilde{u}}_{N,k}(t) + k^2\widetilde{u}_{N,k}(t) - (f, e^{ikx})_h = 0, \\ \widetilde{u}_{N,k}(0) = (u^0)^{\sim}_k, \quad -N \le k \le N-1. \end{cases} \tag{5.41}$$

关系式 (5.38) 和 (5.39) 给出了 $\{u_N(x_j,t)\}_{j=0}^{2N-1}$(物理向量) 和 $\{\widetilde{u}_{N,k}(t)\}_{k=-N}^{N-1}$ (频谱向量) 之间的转换公式, t 被视作参数. 通常称 (5.38) 为离散 Fourier 变换, 而 (5.39) 则是它的逆变换. 离散变换 (5.38) 和 (5.39) 均可通过快速 Fourier 算法 (FFT) 实现.

比较一下定义式 (5.32) 和 (5.37), 可以看出, 拟谱方法与谱方法的不同之处就是将 (5.32) 中的内积 $(\cdot,\cdot)$ 改为离散内积 $(\cdot,\cdot)_h$.

从定义式 (5.37) 出发, 仿照谱方法的论证和利用 I_N 算子的性质, 不难证明拟谱近似解 $u_N(x,t)$ 满足与前面已证明的 Fourier-Galerkin 法同等的误差估计式, 即

$$\|u_N(\cdot,t) - u(\cdot,t)\| \le CN^{-m}\|u(\cdot,t)\|_m \tag{5.42}$$

其中 C 是与 N 和 u 无关的常数.

Chebyshev 配置法

前面用 Fourier-Galerkin 法和 Fourier 配置法构造出含周期边值条件: $u(x+2\pi,t) = u(x,t)$ 的热传导 (抛物方程) 问题的离散近似. 如何将谱 (拟谱) 方法推广, 使之适用于非周期边值条件问题是人们颇为关注的一个研究课题.

现在考虑如下形式的初边值问题:

$$\begin{cases} u_t - u_{xx} = f(x,t), & -1 < x < 1, \quad 0 < t \le T, \\ Bu = 0, & x = \pm 1, \quad 0 < t \le T, \\ u(x,0) = u^0(x), & -1 < x < 1. \end{cases} \tag{5.43}$$

其中 $Bu = 0$ 代表在区间 $[-1,1]$ 端点 $x = \pm 1$ 处指定的边值条件 (一般的属于非周期条件). 作为特例, $Bu = u$ 情形为 Dirichlet 边值条件, 而情形 $Bu = u_x$ 则属 Neumann 边值条件.

于此, 在区间 $[-1,1]$ 上选择配置点: $x_j = \cos\dfrac{j\pi}{N}, j = 0,1,\cdots,N$. 这是以 $\omega(x) = \dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 为权的 Gauss-Lobatto 求积公式中的节点, 该公式中的权系数为:

$\omega_k = \frac{\pi}{N}, k = 1,2,\cdots,N-1$, $\omega_0 = \omega_N = \frac{\pi}{2N}$. 然后，按配置法的原理定义初边值问题 (5.43) 的下述离散化近似：求 $u_N(\cdot,t) \in \mathbf{P}_N, t \in [0,T]$, 使得

$$\begin{cases} ((u_N)_t - (u_N)_{xx} - f)(x_j,t) = 0, & 1 \le j \le N-1, \\ Bu(x_j,t) = 0, & j = 0,1, \\ u_N(x_j,0) = u^0(x_j), & 1 \le j \le N-1. \end{cases} \tag{5.44}$$

设 $u_N(x,t) = \sum\limits_{k=0}^{N} \hat{u}_{N,k}(t)T_k(x)$, 其中

$$\hat{u}_{N,k}(t) = \frac{1}{\pi c_k}\int_{-1}^{1} u_N(x,t)T_k(x)\mathrm{d}x, \tag{5.45}$$

$$c_k = 1, \quad 当 \quad k \ge 1, \quad c_0 = 2.$$

下面讨论 $u_N(x,t)$ 对 x 微商的 Chebyshev 展开. 为简化记号, 设 $u(x) = \sum\limits_{k=0}^{N} \hat{u}_k T_k(x)$, 则 $u^{(1)}(x) = u'(x) = \sum\limits_{k=0}^{N} \hat{u}_k T_k'(x)$. 因 $u^{(1)}(x) \in \mathbf{P}_{N-1}$, 故可令 $u^{(1)}(x) = \sum\limits_{k=0}^{N-1} \hat{u}_k^{(1)} T_k(x)$. 由

$$2T_k(x) = \frac{1}{k+1}T_{k+1}'(x) - \frac{1}{k-1}T_{k-1}'(x)$$

可知

$$c_k\hat{u}_k^{(1)} = \hat{u}_{k+2}^{(1)} + 2(k+1)\hat{u}_{k+1}, \quad 0 \le k \le N-1.$$

因 $\hat{u}_k^{(1)} = 0$ 当 $k \ge N$, 故可利用上式以递减的次序逐个算出 $\hat{u}_{N-1}^{(1)}$, $\hat{u}_{N-2}^{(1)},\cdots,\hat{u}_0^{(1)}$. 一般地，有

$$c_k\hat{u}_k^{(q)} = \hat{u}_{k+2}^{(q)} + 2(k+1)\hat{u}_{k+1}^{(q-1)},$$

特别由

$$\hat{u}_k^{(2)} = \frac{1}{c_k}\sum_{\substack{p=k+2 \\ p+k\ 为偶数}} p(p^2-k^2)\hat{u}_p \tag{5.46}$$

可得二阶导数 $u^{(2)}(x)$ 的 Chebyshev 展开.

将 $u_N(x_j,t)$ 及其导数的展开式代入 (5.44), 则得关于 $\{\hat{u}_{N,k}(t)\}_{k=0}^{N}$ 的一个一阶线性常微分方程组，相应的初值条件为

$$\hat{u}_{N,k}(0) = (u^0)_k^{\sim}, \quad 0 \le k \le N,$$

其中 $(u^0)_k^{\sim}$ 是 $I_N^c u^0 = \sum\limits_{k=0}^{N}(u^0)_k^{\sim}T_k(x)$ 中的系数. 当解此初值问题求出 $\{\hat{u}_{N,k}(t)\}_{k=0}^{N}$

之后，再用逆变换 $u_N(x_j,t)=\sum_{k=0}^{N}\hat{u}_{N,k}(t)T_k(x_j)$ 即可得所需的近似解，于此可以借助类似于离散 Fourier 变换的快速算法得以实现.

最后，仅就 $Bu=u$ 即 Dirichlet 边值条件：$u(\pm1,t)=0$ 的情形，讨论一下 Chebyshev 配置法近似解的收敛性和误差估计.

记 $X_N=\{u(x)\in \mathbf{P}_N; u(\pm1)=0\}$. 引用前节中定义的离散内积：

$$(u,v)_N=\sum_{k=0}^{N}u(x_j)v(x_j)\omega_j,\quad \forall u,v\in C[-1,1], \tag{5.47}$$

其中 $\{x_j\}$ 和 $\{w_j\}$ 是 Gauss-Lobatto 求积公式的节点和权系数. 此时，可将 Chebyshev 配置法的离散化方程写成

$$((u_N)_t-(u_N)_{xx}-f,v)_N=0,\quad \forall v\in X_N,\quad t>0, \tag{5.48}$$

$$(u_N,v)_N=(u^0,v)_N,\quad \forall v\in X_N,\quad t=0. \tag{5.49}$$

设 $u(x,t)$ 为热传导方程 Dirichlet 问题的真解. 令 $R_Nu(\cdot,t)\in X_N$ 是由下式所定义的 $u(\cdot,t)$ 的“椭圆投影”:

$$((R_Nu)_x,v_x)_N=-(u_{xx},v)_N,\quad \forall v\in X_N. \tag{5.50}$$

由于对任意 $u\in X_N$,

$$\begin{aligned}(u_x,u_x)_N&=\sum_{j=0}^{N}u_x(x_j)u_x(x_j)\omega_j\\&=\int_{-1}^{1}(u_x)^2\omega\mathrm{d}x>0,\quad 当\ u\neq 0\end{aligned}$$

因此 $R_Nu(\cdot,t)\in X_N$ 可由 (5.50) 惟一确定，并且有理由相信 $R_Nu(x,t)$ 是真解 $u(x,t)$ 的一个足够好的近似. 现在，将 $R_Nu(x,t)$ 作为一个中介，考虑 u_N 与 R_Nu 之间的距离即 $\theta_N=u_N-R_Nu\in X_N$. 显然真解 $u(x,t)$ 满足

$$(u_t-u_{xx}-f,v)_N=0,\quad \forall v\in X_N, \tag{5.51}$$

将 (5.48) 减 (5.51) 便知 θ_N 满足

$$((\theta_N)_t-(\theta_N)_{xx},v)_N=-((R_Nu-u)_t,v)_N+((R_Nu-u)_{xx},v)_N$$

在上式中取 $v=\theta_N$, 并注意到

$$\begin{aligned}-((\theta_N)_{xx},\theta_N)_N &= -\sum_{j=0}^{N}(\theta_N)_{xx}(x_j,t)\theta_N(x_j,t)\omega_j\\ &= -\int_{-1}^{1}(\theta_N)_{xx}\theta_N\omega\mathrm{d}x\\ &\geq \frac{1}{4}\int_{-1}^{1}(\theta_N)_x^2\omega\mathrm{d}x\geq 0,\end{aligned}$$

可得

$$\begin{aligned}&\|\theta_N(t)\|_N\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\theta_N(t)\|_N\\ &\leq (\|(R_Nu-u)_t\|_N+\|(R_Nu-u)_{xx}\|_N)\|\theta_N(t)\|_N,\end{aligned}$$

消去公共因子后再对 t 积分, 便得

$$\begin{aligned}\|\theta_N(t)\|_N\leq{}&\|\theta_N(0)\|_N\\ &+\int_0^t(\|(R_Nu-u)_t\|_N+\|(R_Nu-u_{xx})\|_N)\mathrm{d}s,\end{aligned}\tag{5.52}$$

其中

$$\begin{aligned}\|\theta_N(0)\|_N&=\|I_N^cu^0-R_Nu^0\|_N\leq C\|I_N^cu^0-R_Nu^0\|_\omega\\ &\leq C(\|I_N^cu^0-u^0\|_\omega+\|R_Nu^0-u^0\|_\omega).\end{aligned}\tag{5.53}$$

由前节定理 5.2 知: $\|I_N^cu^0-u^0\|_\omega\leq CN^{-\sigma}\|u^0\|_{\sigma,\omega}$, 当 $u^0\in H_\omega^\sigma(-1,1)$. 综合以上分析, 只要对于椭圆投影的误差 R_Nu-u 建立必要的估计, 将其代入 (5.52) 和 (5.53), 再对 $u_N-u=\theta_N+(R_Nu-u)$ 应用三角不等式即可建立近似解 u_N 与真解 u 之间的误差估计式.

§5.3 对一阶偏微问题的应用

高维不变环面的计算

设 $T^p=\{\theta=(\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_p):\theta_j\in R(\mathrm{mod}2\pi)\}$, 它是一个 p 维环面. 考虑定义在 T^p 上的线性偏微分方程组:

$$\begin{aligned}&\sum_{j=1}^{p}f_j(\theta)\frac{\partial R_i}{\partial\theta_j}+\sum_{k=1}^{q}b_{ik}(\theta)R_k=g_i(\theta),\\ &\qquad i=1,2,\cdots,q,\ \theta\in T^p,\end{aligned}\tag{5.54}$$

其中 $f_i, b_{ik}, g_i : T^p \to R$ 为已知函数， $R = (R_1(\theta), R_2(\theta), \cdots, R_q(\theta))^{\mathrm{T}} : T^p \to R^q$ 为待求未知函数. 此模型来源于微分动力系统不变环面的计算 ([62]). 以下，记 $f = (f_1, f_2, \cdots, f_p)$, $b = (b_{ik})_{q\times q}$, $g = (g_1, g_2, \cdots, g_q)^{\mathrm{T}}$, 于是可将 (5.54) 写成

$$(f(\theta)\cdot\nabla)R + b(\theta)R = g.$$

如果存在正常数 $\beta > 0$, 使得

$$\left\langle \left(b(\theta) - \frac{1}{2}(\mathrm{div} f(\theta))I\right)\eta, \eta \right\rangle \geq \beta|\eta|^2, \quad \forall \eta \in R^q,\ \theta \in T^p, \tag{5.55}$$

则称方程组 (5.54) 为耗散型.

定理 5.7[59] *假定 (5.54) 为耗散型，则其弱解存在并满足*

$$\|R(\theta)\| \leq \frac{1}{\beta}\|g(\theta)\|. \tag{5.56}$$

这里，若函数 $R(\theta) \in L^2(T^p, R^q)$ 满足

$$-(R, (f\cdot\nabla)v) + ((b - \mathrm{div} f)R, v) = (g, v), \quad \forall v \in H^1(T^p, R^q), \tag{5.57}$$

则称 $R(\theta)$ 为 (5.54) 的弱解.

令 $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 和 $|\cdot|$ 代表复向量空间 $\mathbb{C}^q$ 中的内积和相应的模：$\langle\xi,\eta\rangle = \sum_{i=1}^{q}\xi_i\overline{\eta_i}$, $|\xi| = \langle\xi,\xi\rangle^{\frac{1}{2}}$. 对于函数 $R, V \in L^2(T^p, \mathbb{C}^q)$, 定义内积、范数

$$(R, V) = \int_{T^p}\langle R(\theta), V(\theta)\rangle \mathrm{d}\theta, \quad \|R\| = (R, R)^{\frac{1}{2}}.$$

记 $k = (k_1, k_2, \cdots, k_p)$, $k_j \in \mathbb{Z}$, $\langle k, \theta\rangle = k_1\theta_1 + k_2\theta_2 + \cdots + k_p\theta_p$. 已知函数系

$$(2\pi)^{-p/2}e^{i\langle k,\theta\rangle}, \quad k \in Z^p,\ i = \sqrt{-1}, \tag{5.58}$$

构成空间 $L^2(T^p, \mathbb{C}^q)$ 的一标准正交基. 设

$$S_N = \mathrm{span}\{(2\pi)^{-p/2}e^{i\langle k,\theta\rangle},\ k \in Z^p, |k_j| \leq N\}$$

和算子 P_N 为从 $L^2(T^p, \mathbb{C}^q)$ 到 S_N 的投影算子，则

$$P_N R(\theta) = \sum_{k\in Z^p, |k_j|\leq N} \widehat{r}(k)e^{i\langle k,\theta\rangle}, \quad \widehat{r}(k) \in \mathbb{C}^q, \quad \widehat{r}(k) = (2\pi)^{-p/2}\int_{T^p} R(\theta)e^{-i\langle k,\theta\rangle}\mathrm{d}\theta, \tag{5.59}$$

且有

$$\|P_N R\|^2 = \sum_{k\in Z^p,|k_j|\le N} |\widehat{r}(k)|^2 \quad (\text{Parseval 等式}) \tag{5.60}$$

和

$$\|R - P_N R\|_l \le CN^{l-s}\|R\|_s, \quad \forall R \in H^s(T^p, \mathbb{C}^q). \tag{5.61}$$

为定义 S_N 上的插值算子，用如下均匀网格的节点集

$$T_h^p = \{(n_1 h_1, \cdots, n_p h_p) : n_j \in Z(\mathrm{mod} M_j)\},$$
$$h = (h_1, \cdots, h_p),\ h_j = \frac{2\pi}{M_j}, (M_j = 2N_j + 1)$$

代替 T^p. 对于函数 $R_N, V_N : T_h^p \to \mathbb{C}^q$, 定义离散内积和范数

$$\begin{aligned}(R_N, V_N)_h &= h_1 h_2 \cdots h_p \sum_{\theta\in T_h^p} \langle R_N(\theta), V_N(\theta)\rangle,\\ \|R_N\|_h &= (R_N, R_N)_h^{\frac{1}{2}}.\end{aligned} \tag{5.62}$$

设 $R(\theta) : T^p \to \mathbb{C}^q$ 是一个连续函数，它在 S_N 上的插值定义为

$$\begin{aligned}I_N R(\theta) &= (2\pi)^{-p/2} \sum_{k\in Z^p,|k_j|\le N} \widetilde{r}(k) e^{i\langle k,\theta\rangle} \in S_N,\\ \widetilde{r}(k) &= (2\pi)^{-p/2}(R(\theta), e^{i\langle k,\theta\rangle})_h,\end{aligned} \tag{5.63}$$

也就是说，

$$(I_N R)(\theta) = R(\theta), \quad \forall\theta \in T_h^p. \tag{5.64}$$

算子 I_N 具有逼近性质：当 $s > \frac{p}{2}$,

$$\|R - I_N R\|_l \le CN^{l-s}\|R\|_s, \quad \forall R \in H^s(T^p, \mathbb{C}^q). \tag{5.65}$$

容易看出，这里介绍的投影和插值算子是 §5.1 中所讨论的一维情形的自然推广.

偏微分方程组 (5.54) 的谱近似为：求 $R_h(\theta) \in S_N$, 使得

$$\begin{aligned}&((f\cdot\nabla)R_N, V_N) + (bR_N, V_N) = (g, V_N),\\ &\forall V_N \in S_N.\end{aligned} \tag{5.66}$$

利用投影算子 P_N, (5.66) 又可写成

$$P_N(f\cdot\nabla)R_N + P_N b R_N = P_N g. \tag{5.67}$$

关于 (5.54) 的拟谱近似的构造会因变分形式的差别有所不同. 这里, 我们建立 (5.54) 的如下拟谱近似: 求 $R_N(\theta)\in S_N$, 使得

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\left[((f\cdot\nabla)R_N,V_N)_h-(R_N,(f\cdot\nabla)V_N)_h\right]\\&\quad+\left((b-\frac{1}{2}(\mathrm{div}f)I)R_N,V_N\right)_h=(g,V_N)_h,\\&\quad\forall V_N\in S_N.\end{aligned}\tag{5.68}$$

因 S_N 为有限维函数空间, 所以 (5.67) 和 (5.68) 都可以写成线性代数方程组的形式, 容易求解.

定理 5.8[59] *假定方程组 (5.54) 满足条件 (5.55), 且其解 $R(\theta)\in H^s(T^p,R^q)$, 则此方程组的谱与拟谱近似即方程 (5.67) 和 (5.68) 均有惟一解, 统一记为 $R_N(\theta)$, 它满足*

$$\|R_N(\theta)\|\le\frac{1}{\beta}\|g(\theta)\|\tag{5.69}$$

和

$$\|R_N(\theta)-R(\theta)\|\le C(\beta,g,b)N^{-s+1}\|g\|_s,\quad s\ge0.\tag{5.70}$$

(在拟谱方法情形, (5.69) 和 (5.70) 中的范数 $\|\cdot\|$ 应改为 $\|\cdot\|_h$).

文献 [59] 中给出一个简单算例:

$$\begin{aligned}&-\cos x\frac{\partial R}{\partial x}-\sin y\frac{\partial R}{\partial y}+bR=\sin^b y,\\&\quad x,y\in[0,2\pi],\end{aligned}\tag{5.71}$$

其中 $b>0$ 是一个参数. 当 $b>1$ 时, (5.11) 属于耗散型. 在 $b=1$ 情形, (5.71) 的解 $R(x,y)$ 在 $y=0,2\pi$ 附近的 y 方向有剧烈变化.

非线性守恒方程的谱近似

考虑如下无黏性项的 Buger 方程的周期边值问题:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}(x,t)+\dfrac{\partial}{\partial x}\left(\dfrac{1}{2}u^2(x,t)\right)=0,\quad t>0,\\u(x,0)=u(x+2\pi,0).\end{cases}\tag{5.72}$$

此方程的特性在于其解可能发生强间断 (激波解), 通常要讨论它的弱解, 即在间断线上满足某类间断条件的分片光滑解. 另外, 此种弱解也是不惟一的. 因此, 在寻求此方程具有物理意义的解 (又称物理解或熵解) 时, 增加一种称为 “熵条件” 的附加要求, 粗略的讲就是要求解 $u(x,t)$ 在一定意义 (“ distribution”) 下满足

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{u^2(x,t)}{2}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{u^3(x,t)}{\partial x}\right)\le0.\tag{5.73}$$

当选定有限维空间 S_N (见 §5.1), 求解方程 (5.72) 的谱方法就是求 $u_N(\cdot,t)\in S_N$, 满足方程

$$\frac{\partial}{\partial t}u_N(x,t)+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{2}P_Nu_N^2(x,t)\right)=0,\ t>0, \tag{5.74}$$

以及初值条件

$$u_N(x,0)=P_Nu(x,0).$$

用 u_N 乘 (5.74) 并对 x 从 0 到 2π 作积分，可得

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^{2\pi}u_N^2(x,t)\mathrm{d}x+\int_0^{2\pi}u_N(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{2}u_N^2(x,t)\right)\mathrm{d}x=0.$$

根据 $u_N(x,t)$ 的周期性，上式右端第二项为零，于是有

$$\int_0^{2\pi}u_N^2(x,t)\mathrm{d}x=\int_0^{2\pi}u_N^2(x,0)\mathrm{d}x\le\int_0^{2\pi}u^2(x,0)\mathrm{d}x. \tag{5.75}$$

由此估计式，存在 $\overline{u}(x,t)=w\text{-}\lim\limits_{N\to\infty}u_N(x,t)$, 并且 $\overline{u}(x,t)$ 是 (5.72) 的一个弱解. 但是 $\overline{u}(x,t)$ 并非满足 (5.73) 的熵解.

在 [57](Y. Maday 和 E. Tadmor, 1989) 中，借助黏性消失法的思想建立了求解非线性守恒方程 (5.72) 的一种谱和拟谱离散逼近. 为表述的方便, 引进算子 A_N (混迭算子):

$$A_Nu(x,t)=\sum_{k=-N}^{N}\left[\sum_{\substack{j=-\infty\\ j\neq 0}}^{+\infty}\widehat{u}(k+j(2N+1))\right]e^{ikx}. \tag{5.76}$$

由 §5.1 中公式 (5.14) 可知： $I_N=P_N+A_N$, P_N 和 I_N 分别为 S_N 上的投影算子和插值算子. 如果，令 $L_N=P_N+aA_N$, 则 $L_N=P_N$ 当 $a=0$, $L_N=I_N$ 当 $a=1$. 文献 [57] 中对于方程 (5.72) 的半离散逼近为

$$\frac{\partial}{\partial t}u_N(x,t)+\frac{\partial}{\partial x}\left(L_N\frac{1}{2}u_N^2(x,t)\right)=\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\left(Q_N*\frac{\partial}{\partial x}u_N(x,t)\right). \tag{5.77}$$

上式右端是附加黏性项，利用 Fourier 系数此项可表示为

$$-\varepsilon\sum_{|k|\le N}k^2\widehat{Q}(k)\widehat{u}(k,t)e^{ikx}, \tag{5.78}$$

其中 $\widehat{Q}(k)$ 如此选择：设 $m=m(N)\le\frac{1}{4}N$

$$\begin{cases}\widehat{Q}(k)=0, & 当|k|<m;\\ 0\le\widehat{Q}(k)\le 1, & 当m\le|k|\le 2m;\\ \widehat{Q}(k)\equiv 1, & 当2m<|k|\le N.\end{cases} \tag{5.79}$$

也就是说，黏性算子 Q_N 仅仅作用于 $u_N(x,t)$ 的高频部分.

进一步假设：

(1) 存在常数 C 使得

$$\|(I-Q_N(\cdot))\|_{L^1} \le C\log m; \tag{5.80}$$

(2) $$\|u_N(\cdot,0)\|_{L^\infty} \le \sum_{|k|\le N} |\widehat{u}(k,0)| \le C, \tag{5.81}$$

则有如下理论分析结果.

定理 5.9[57] 对于谱 $(a=0)$ 和拟谱 $(a=1)$ 近似 (5.77), 如果其中参数 (ε,m) 如此选择：

$$\varepsilon=\varepsilon(m)\sim\alpha\frac{1}{m^2\cdot\|I-Q_N\|_{L^1}},$$
$$m=m(N)\sim CN^\beta,\ 0<\beta<\frac{1}{4},$$

则 $u_N(x,t)$ 几乎处处、有界地收敛到方程 (5.72) 的熵解.

文献 [57] 未讨论半离散方程 (5.77) 的时间离散化问题，仅建议采用 Runge-Kutta 方法计算 (5.77) 的解，给出了无黏性项格式 (5.74) 与带黏性项格式 (5.77) 的算例，对于两种格式的计算结果进行了比较.

§5.4 离散 Fourier 变换的快速算法

在前面一节介绍的谱与拟谱方法中，为了计算近似解 u_N 必需实现离散数据 $\{u_N(x_j)\}_{j=0}^{2N-1}$(物理向量) 与 $\{\hat{u}_{N,k}\}_{k=-N}^{N-1}$ (频谱向量) 之间的相互转换. 上述转换的计算量非常大，每实现一次这样的转换需要花费 $O(N^2)$ 次复数乘法运算. 1965 年， Cooley 和 Tukey 提出了一种处理离散 Fourier 变换 (DFT) 的快速算法，它使计算 DFT 的工作量由原来的 $O(N^2)$ 降为 $O(N\log_2 N)$, 为谱与拟谱方法的推广、应用创造了条件. 此外， DFT 快速算法还在数字与图像处理、滤波技术等领域被广泛应用.

本节首先讨论如下离散 Fourier 变换的计算问题：给定实的或复的数列 $\{A_k\}_{k=0}^{N-1}$, 要计算

$$X_j=\sum_{k=0}^{N-1}A_k e^{i2\pi jk/N},\quad j=0,1,\cdots,N-1,\quad i=\sqrt{-1}, \tag{5.82}$$

称数列 $\{X_j\}_{j=0}^{N-1}$ 为数列 $\{A_k\}_{k=0}^{N}$ 的离散 Fourier 变换. 直接按上述表达式计算 $\{X_j\}_{j=0}^{N-1}$ 需做 N^2 次复数乘法运算. 如果考虑到 $\omega_N=e^{i2\pi/N}$ 的周期性： $(\omega_N)^J=1$, 当 J 为 N 的整数倍，并采用一种逐次分半的递推算法，便可使计算 $\{X_j\}_{j=0}^{N-1}$ 的工作量大大的降低. 下面就来分析和推倒这种算法.

令 $N=2^m$，将整数 k 和 j 写成二进制的形式：

$$k=k_{m-1}2^{m-1}+k_{m-2}2^{m-2}+\cdots+k_0,$$

$$j=j_{m-1}2^{m-1}+j_{m-2}2^{m-2}+\cdots+j_0$$

其中 k_ν, j_ν 为 0 或 1，$\nu=0,1,\cdots,m-1$. 记

$$A_k=A(k_{m-1},k_{m-2},\cdots,k_0),$$

$$X_j=X(j_{m-1},j_{m-2},\cdots,j_0)$$

则可将变换 (5.82) 写成

$$\begin{aligned}&X(j_{m-1},j_{m-2},\cdots,j_0)\\&=\sum_{k_0=0}^{1}\sum_{k_1=0}^{1}\cdots\sum_{k_{m-1}=0}^{1}A(k_{m-1},k_{m-2},\cdots,k_0)\omega_N^{jk}.\end{aligned}\tag{5.83}$$

由于 $\omega_N=e^{i2\pi/2^m}$，故 $\omega_N^{2^m}=1$. 注意到

$$\begin{aligned}&\omega_N^{jk}\\&=\omega_N^{(j_{m-1}2^{m-1}+j_{m-2}2^{m-2}+\cdots+j_0)(k_{m-1}2^{m-1}+k_{m-2}2^{m-2}+\cdots+k_0)}\\&=\omega_N^{(j_{m-1}2^{m-1}+\cdots+j_12)k_{m-1}2^{m-1}}\\&\quad\cdot\omega_N^{j_0k_{m-1}2^{m-1}}\omega_N^{j(k_{m-2}2^{m-2}+\cdots+k_0)}\\&=\omega_N^{j_0k_{m-1}2^{m-1}}\omega_N^{j(k_{m-2}2^{m-2}+\cdots+k_0)},\end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned}&X(j_{m-1},j_{m-2},\cdots,j_0)\\&=\sum_{k_0=0}^{1}\cdots\sum_{k_{m-2}=0}^{1}\left(\sum_{k_{m-1}=0}^{1}A(k_{m-1},k_{m-2},\cdots,k_0)\right.\\&\quad\left.\cdot\omega_N^{j_0k_{m-1}2^{m-1}}\right)\cdot\omega_N^{j(k_{m-2}2^{m-2}+\cdots+k_0)}\\&=\sum_{k_0=0}^{1}\cdots\sum_{k_{m-2}=0}^{1}A_1(j_0,k_{m-2},\cdots,k_0)\omega_N^{j(k_{m-2}2^{m-2}+\cdots+k_0)},\end{aligned}\tag{5.84}$$

其中

$$\begin{aligned}&A_1(j_0,k_{m-2},\cdots,k_0)\\&=\sum_{k_{m-1}=0}^{1}A(k_{m-1},k_{m-2},\cdots,k_0)\omega_N^{j_0k_{m-1}2^{m-1}}\end{aligned}$$

如此系数 $A_1(j_0, k_{m-2}, \cdots, k_0)$ 共有 $N = 2^m$ 个，计算每一个需要 2 次乘法，所以计算所有的 $A_1(j_0, k_{m-2}, \cdots, k_0)$ 共需 2^{m+1} 次乘法运算．现在再对 (5.84) 右端的 $\omega_N^{j(k_{m-2}2^{m-2}+\cdots+k_0)}$ 作分解．注意到

$$\omega_N^{j(k_{m-2}2^{m-2}+\cdots+k_0)} = \omega_N^{(j_1 2+j_0)k_{m-2}2^{m-2}} \cdot \omega_N^{j(k_{m-3}2^{m-3}+\cdots+k_0)},$$

因此，有

$$\begin{aligned} & X(j_{m-1}, j_{m-2}, \cdots, j_0) \\ = & \sum_{k_0=0}^{1} \cdots \sum_{k_{m-3}=0}^{1} \sum_{k_{m-2}=0}^{1} A_1(j_0, k_{m-2}, \cdots, k_0) \\ & \cdot \omega_N^{(j_1 2+j_0)k_{m-2}2^{m-2}} \omega_N^{j(k_{m-3}2^{m-3}+\cdots+k_0)} \\ = & \sum_{k_0=0}^{1} \cdots \sum_{k_{m-3}=0}^{1} A_2(j_0, j_1, k_{m-3}, \cdots, k_0) \omega_N^{j(k_{m-3}2^{m-3}+\cdots+k_0)}, \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} & A_2(j_0, j_1, k_{m-3}, \cdots, k_0) \\ = & \sum_{k_{m-2}=0}^{1} A_1(j_0, k_{m-2}, \cdots, k_0) \omega_N^{(j_1 2+j_0)k_{m-2}2^{m-2}}. \end{aligned}$$

计算所有的 $A_2(j_0, j_1, k_{m-3}, \cdots, k_0)$ 同样需要 2^{m+1} 次乘法运算．如此继续下去，可得

$$\begin{aligned} & A_l(j_0, \cdots, j_{l-1}, k_{m-l-1}, \cdots, k_0) \\ = & \sum_{k_{m-l}=0}^{1} A_{l-1}(j_0, \cdots, j_{l-2}, k_{m-l}, \cdots, k_0) \cdot \omega_N^{(j_{l-1}2^{l-1}+\cdots+j_0)k_{m-l}2^{m-l}} \end{aligned} \quad (5.85)$$

最后，当 $l = m$ 时，有

$$A_m(j_0, j_1, \cdots, j_{m-1}) = X(j_{m-1}, j_{m-2}, \cdots, j_0). \quad (5.86)$$

于是完成了离散 Fourier 变换的计算．现在计算一下上述递推算法所需的乘法运算次数．每步递推，计算一组 $A_l(j_0, \cdots, j_{l-1}, k_{m-l-1}, \cdots, k_0)$ 需要 2^{m+1} 次乘法，一共递推 m 步，所以总共需要 $m \cdot 2^{m+1}$ 次乘法运算．由于 $N = 2^m$，故 $m = \log_2 N$，从而上述离散 Fourier 变换的快速算法所需的乘法运算次数为 $2N \log_2 N$．例如，当 $m = 10$，按公式 (5.82) 直接计算，所需的乘法次数为 $N^2 = (2^{10})^2 = 1048576$，即超过了百万次，而若采用快速算法，那么所需的乘法次数仅为 $2N \log_2 N = 2 \cdot 2^{10} \log_2 2^{10} = 20480$．由此可见，快速算法大大地减少了计算量．

由前面推演的公式看到，如果序列 $\{A_k\}$ 在初始是按自然次序排列的，那么变换后得到的序列 $\{X_j\}$ 将按逆二进制排列. 也就是说，若 A_k 存放在单元 $A(k_{m-1}, k_{m-2},\cdots,k_0)$ 中，则在计算完成之后所得结果 $X(k_{m-1},k_{m-2},\cdots,k_0)$ 出现在单元 $A(k_0,k_1,\cdots,k_{m-1})$ 之中.

现在再来说明一下有关 (5.82) 的逆变换的计算. 如果在 (5.82) 中已知的是 $\{X_j\}_{j=0}^{N-1}$，需要计算 $\{A_k\}_{k=0}^{N-1}$. 将 (5.82) 式两端同乘 $e^{-i2\pi jl/N}, l=0,1,\cdots,N-1$，然后对 j 求和可得

$$\begin{aligned}\sum_{j=0}^{N-1} X_j e^{-i2\pi jl/N} &= \sum_{k=0}^{N-1} A_k \sum_{j=0}^{N-1} e^{i2\pi j(k-l)/N} \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} A_k \sum_{j=0}^{N-1} (e^{i2\pi(k-l)/N})^j.\end{aligned}$$

记 $q=e^{i2\pi(k-l)/N}$，注意到

$$\begin{aligned}\sum_{j=0}^{N-1} q^j &= \frac{1-q^N}{1-q} = \frac{1-e^{i2\pi(k-l)}}{1-e^{i2\pi(k-l)/N}} \\ &= \begin{cases} N, & \text{当} k=l, \\ 0, & k\neq l, \end{cases}\end{aligned}$$

则有

$$\sum_{j=0}^{N-1} X_j e^{-i2\pi jl/N} = NA_l$$

从而有

$$A_l = \frac{1}{N}\sum_{j=0}^{N-1} X_j e^{-i2\pi jl/N}, \quad l=0,1,\cdots,N-1, \tag{5.87}$$

此即 (5.82) 的逆变换. 不难看出，由 $\{X_j\}_{j=0}^{N-1}$ 往求 $\{A_k\}_{k=0}^{N-1}$ 的计算与前面的计算过程基本一致，因而所需计算量也是一致的.

下面以 $N=2^3$ 为例看看 DFT 的整个计算过程. 将 j,k 写成二进制形式:

$$j=(j_2 2^2+j_1 2+j_0)=(j_2,j_1,j_0),$$

$$k=(k_2 2^2+k_1 2+k_0)=(k_2,k_1,k_0).$$

此时

$$\begin{aligned}\omega_N^{jk} &= \omega_N^{(j_2 2^2+j_1 2+j_0)(k_2 2^2+k_1 2+k_0)} \\ &= \omega_N^{j_0 k_2 2^2}\omega_N^{(j_1 2+j_0)k_1 2}\omega_N^{(j_2 2^2+j_1 2+j_0)k_0}\end{aligned}$$

(这里用到 $\omega_N^{2^3}=\omega_N^{2^4}=1$), 于是

$$
\begin{aligned}
X(j_2,j_1,j_0) &= \sum_{k_0=0}^{1}\sum_{k_1=0}^{1}\sum_{k_2=0}^{1} A(k_2,k_1,k_0)\omega_N^{jk}\\
&= \sum_{k_0=0}^{1}\sum_{k_1=0}^{1}\sum_{k_2=0}^{1} A(k_2,k_1,k_0)\omega_N^{j_0k_2 2^2}\cdot\\
&\quad \omega_N^{(j_1 2+j_0)k_1 2}\cdot\omega_N^{(j_2 2^2+j_1 2+j_0)k_0}\\
&= \sum_{k_0=0}^{1}\left\{\sum_{k_1=0}^{1}\left[\sum_{k_2=0}^{1} A(k_2,k_1,k_0)\omega_N^{(j_0,0,0)k_2}\right]\cdot\right.\\
&\quad \left.\omega_N^{(j_1,j_0,0)k_1}\right\}\omega_N^{(j_2,j_1,j_0)k_0}.
\end{aligned}
$$

由上式可得如下递推公式:

$$
\begin{aligned}
A_0(k_2,k_1,k_0) &= A(k_2,k_1,k_0),\\
A_1(j_0,k_1,k_0) &= \sum_{k_2=0}^{1} A_0(k_2,k_1,k_0)\omega_N^{(j_0,0,0)k_2}\\
&= A_0(0,k_1,k_0)\omega_N^{(0,0,0)} + A_0(1,k_1,k_0)\omega_N^{(j_0,0,0)},\\
A_2(j_0,j_1,k_0) &= \sum_{k_1=0}^{1} A_1(j_0,k_1,k_0)\omega_N^{(j_1,j_0,0)k_1}\\
&= A_1(j_0,0,k_0)\omega_N^{(0,0,0)} + A_1(j_0,1,k_0)\omega_N^{(j_1,j_0,0)},\\
A_3(j_0,j_1,j_2) &= \sum_{k_0=0}^{1} A_2(j_0,j_1,k_0)\omega_N^{(j_2,j_1,j_0)k_0}\\
&= A_2(j_0,j_1,0)\omega_N^{(0,0,0)} + A_2(j_0,j_1,1)\omega_N^{(j_2,j_1,j_0)}\\
&= X(j_2,j_1,j_0).
\end{aligned}
$$

下面的图表给出 $N=2^3$ 情形 DFT 算法的计算流程.

输入序号	$A_0(k)$ $A_1(k)$ $A_2(k)$ $A_3(k)X(j)$	输出序号
000	$A(0)\to A_1(0)\to A_2(0)\to A_3(0)X(0)$	000
001	$A(1)\to A_1(1)\to A_2(1)\to A_3(1)X(4)$	100
010	$A(2)\to A_1(2)\to A_2(2)\to A_3(2)X(2)$	010
011	$A(3)\to A_1(3)\to A_2(3)\to A_3(3)X(6)$	110
100	$A(4)\to A_1(4)\to A_2(4)\to A_3(4)X(1)$	001
101	$A(5)\to A_1(5)\to A_2(5)\to A_3(5)X(5)$	101
110	$A(6)\to A_1(6)\to A_2(6)\to A_3(6)X(3)$	011
111	$A(7)\to A_1(7)\to A_2(7)\to A_3(7)X(7)$	111

注记:

谱与拟谱方法的高阶精度，即所谓的谱精度，事实上会受到下列因素的制约: 1) 求解问题中解的奇异性; 2) 非连续函数 (数据) 谱逼近的低阶精度; 3) 非线性问题中的计算不稳定性. 为了克服上述因素造成的不良影响和困难，激励了许多有关无振荡多项式插值、正交多项式重构和某些特殊 Hilbert 空间中逼近理论的研究. 例如，文献 [64] 通过添加非光滑函数到 Fourier 展式中构造出本质上无振荡的谱逼近方法，并应用到无黏性 Burgers 方程间断解的计算. 关于正交多项式的重构和滤波方法亦有许多研究工作 (见 [60] 、 [64]), 其主要目的是增强近似解计算的稳定性. 针对问题的奇异性和无界区域问题，利用特定的正交多项式 (Jacobi, Gegenbauer, Hermit 等) 与相应的带权 Hilbert 空间，建立可行、有效的谱和拟谱方法，这也是人们正在探索、研究的一个重要方向 (见 [60] 、 [63]).

第六章　一些非线性发展方程的保结构算法

动力系统的几何算法诞生于 20 世纪 80 年代中期 ([66], [67]). 冯康在 [66] 、[67] 中从哈密顿系统相空间的辛几何结构出发提出了辛算法 (格式), 并在国内外倡导了几何算法的研究. 几何算法的指导思想, 是计算方法的设计、构造应该在原系统的几何结构、框架之下进行, 无疑地这是对于构造、评价计算方法的依据和观念上的一个重大革新. 从这观点出发所建立的格式 (离散化方程), 由于它保持着原系统的几何结构、基本特征, 从而具有继承、保持连续系统解的整体结构和长时间性态行为的品质, 这往往是许多普通的离散化格式难以达到和具备的显著优点.

发展型偏微分方程可视为无穷维的动力系统, 人们已发现许多物理、力学中的重要非线性发展方程同样地具有辛几何结构 (或 Lie 群结构), 例如 Schrödinger 方程、 Sine-Gordon 方程、 Boussinisq 和 Korteweg de Vries 方程等. 在几何算法的思想启示下, 近十余年来出现了一批关于非线性发展方程的保几何结构算法的研究工作 (见 [67]~[76]), 目前已成为发展方程数值方法研究的热点之一.

本章以几类重要哈密顿型非线性发展方程 (文献中称为 "Hamiltonian PDE") 介绍如何构造它们的保结构数值方法. §6.1 介绍哈密顿系统、辛空间和辛结构等基本概念. §6.2 介绍一维非线性 Schrödinger 方程的一个保结构有限元近似. §6.3 介绍 Sine-Gordon 方程的局部辛形式和多辛算法. §6.4 介绍 Korteweg de Vries 方程的一个哈密顿型的离散近似及其在数值模拟孤立波解中的应用.

§6.1　哈密顿系统、辛结构

在经典力学中, 含 n 个自由度的, 受位势力作用的系统 (称保守系统) 均可用如下形式的一阶常微分方程组描述:

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}q_j}{\mathrm{d}t} = \dfrac{\partial H}{\partial p_j}, \\ \dfrac{\mathrm{d}p_j}{\mathrm{d}t} = -\dfrac{\partial H}{\partial q_j}, \end{cases} \qquad j = 1, 2, \cdots, n, \tag{6.1}$$

其中 $H = H(q_1, \cdots, q_n, p_1, \cdots, p_n)$ 称为哈密顿函数, 它代表所描述力学系统的总能量, $q(t) = (q_1(t), \cdots, q_n(t))$ 为系统的广义坐标, $p(t) = (p_1(t), \cdots, p_n(t))$ 为广义动量. 方程组 (6.1) 称为 n 自由度力学系统的哈密顿形式, 数学上称它为 n 自由度哈密顿系统.

描述 n 自由度系统的运动的熟知形式为牛顿形式和拉格朗日变分形式. 对于保守系统, 设势能函数为 $V = V(q)$, 则方程

$$M\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q} \quad (\text{作用力}F), \quad \ddot{q} = \frac{\mathrm{d}^2 q}{\mathrm{d}t^2}, \tag{6.2}$$

为保守系统的牛顿形式. 另外, 设 $L=L(q,\dot{q},t)(=$ 动能 $-$ 位能$)$ 为拉格朗日函数, 由拉格朗日变分原理, 系统的位移 $q(t)$ 使积分泛函

$$I(q)=\int_{t_0}^{t}L(q,\dot{q},\tau)\mathrm{d}\tau$$

取极小, 根据

$$\left.\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}\lambda}(q+\lambda\delta q)\right|_{\lambda=0}=0,\quad \forall\delta q$$

可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}-\frac{\partial L}{\partial q}=0, \tag{6.3}$$

称此方程为保守系统的拉格朗日形式. 哈密顿系统属于描述保守系统的第三种形式, 其中哈密顿函数 $H=H(q,p)(=$ 动能 $+$ 位能$)$, 这种形式更加全面地反映保守系统的特性 (如对称性), 从它出发构造计算方法会带来多方面的益处.

下面讨论哈密顿系统的辛几何结构及其相流的基本特性.

n 自由度哈密顿系统 (6.1) 的相空间为 R^{2n}. 引进双线性形式 $\omega(\xi,\eta):R^{2n}\times R^{2n}\to R$

$$\omega(\xi,\eta)=\sum_{i=1}^{n}(p_i\wedge q_i)(\xi,\eta),\quad \forall\xi,\eta\in R^{2n}, \tag{6.4}$$

其中

$$(p_i\wedge q_i)(\xi,\eta)=\det\begin{bmatrix}\xi_i & \eta_i\\ \xi_{n+i} & \eta_{n+i}\end{bmatrix}. \tag{6.5}$$

$(p_i\wedge q_i)(\xi,\eta)$ 代表 (p_i,q_i) 平面上由向量 (ξ_i,ξ_{n+i}) 与 (η_i,η_{n+i}) 作成的平行四边形的面积. 显然, $(p_i\wedge q_i)(\xi,\eta)=-(p_i\wedge q_i)(\eta,\xi)$ 于是有

$$\omega(\xi,\eta)=-\omega(\eta,\xi),\quad \forall\xi,\eta\in R^{2n}, \tag{6.6}$$

称偶对 (R^{2n},ω) 为 **辛向量空间**, 并称 $\omega(\xi,\eta)$ 是 **R^{2n} 上的辛结构**. 设 J 代表如下 $2n$ 阶分块矩阵

$$J=\begin{bmatrix}0 & I_n\\ -I_n & 0\end{bmatrix},\quad I_n:n\text{阶单位矩阵}. \tag{6.7}$$

显然, $J^T=-J=J^{-1}$. 利用矩阵 J, 可将 ω 表示为

$$\omega(\xi,\eta)=\xi^TJ\eta,\quad \forall\xi,\eta\in R^{2n}. \tag{6.8}$$

R^{2n} 上的线性算子 S, 如果

$$\omega(S\xi,S\eta)=\omega(\xi,\eta),\quad \forall\xi,\eta\in R^{2n}, \tag{6.9}$$

则称 S 为 **辛算子**. 由 (6.9) 知, 辛结构 $\omega(\xi,\eta)$ 在辛算子的作用下是不改变的. 另外, 一个可微分映射 $g=g(z):R^{2n}\to R^{2n}$, 如果它的 Jacobi 矩阵 $g_*=\partial_z g$(视为 R^{2n} 上的线性算子) 对任意 z 为 $R^{2n}\to R^{2n}$ 的辛算子, 则称 g 为 **正则射影**(canonical map).

令 $z(t)=(q_1(t),q_2(t),\cdots,q_n(t),p_1(t),p_2(t),\cdots,p_n(t))^{\mathrm{T}}$, 则哈密顿系统 (6.4) 可写成

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}=J\cdot\nabla_z H^{\mathrm{T}}. \tag{6.10}$$

给定初值 $z(0)=z^0$, 将方程 (6.10) 以 z^0 为初值的解记为 $z(t)=g_H^t(z^0)$. 固定 $t>0$, $g_H^t(\cdot)$ 可视为从 R^{2n} 到 R^{2n} 的映射, 且 $g_H^t(\cdot)\in C^1(R^{2n})$, 称映射族 $\{g_H^t(\cdot),\ t>0\}$ 为系统 (6.10) 的 **相流**. 哈密顿动力系统 (6.4) 的一重要几何性质, 就是其相流映射 $g_H^t(\cdot)$ 对任意 $t>0$ 都是从 R^{2n} 到 R^{2n} 的正则映射, 即 $\omega(\xi,\eta)$ 是映射 $g=g_H^t(\cdot)$ 的积分不变量

$$g\circ\omega=\omega(g_*\xi,\ g_*\eta)_{g(z)}=\omega(\xi,\eta)_z=\omega. \tag{6.11}$$

由此类推, 可知

$$\omega\wedge\omega,\quad \omega\wedge\omega\wedge\omega,\cdots,\underbrace{\omega\wedge\omega\wedge\cdots\wedge\omega}_{n\ \text{重}} \tag{6.12}$$

均为 $g_H^t(\cdot)$ 的积分不变量. 换言之, 映射 $g_H^t(\cdot)$ 不改变超平面 $(p_{i_1},\cdots,p_{i_k},q_{i_1},\cdots,q_{i_k})$, $1\le k\le n$ 上的面积, 特别地它不改变相空间 R^{2n} 中的体积 $(k=n)$.

最后介绍定义在函数类 $C^1(R^{2n})$ 上的一种运算 $\{\cdot,\cdot\}$: Poisson 括号. 设 $I_1(z)$, $I_2(z)\in C^1(R^{2n})$, $z=(q_1,q_2,\cdots,q_n,p_1,p_2,\cdots,p_n)$, 定义

$$\{I_1,I_2\}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial I_1}{\partial q_i}\frac{\partial I_2}{\partial p_i}-\frac{\partial I_1}{\partial p_i}\frac{\partial I_2}{\partial q_i}\right)\quad:\quad R^{2n}\to R. \tag{6.13}$$

容易验证, 运算 $\{\cdot,\cdot\}$ 满足:

(i) $\{I_1,I_2\}=-\{I_2,I_1\}$; (6.14)

(ii) $\{\alpha I_1+\beta I_2,I_3\}=\alpha\{I_1,I_3\}+\beta\{I_2,I_3\},\ \ \alpha,\beta\in R$; (6.15)

(iii) $\{\{I_1,I_2\},I_3\}+\{\{I_2,I_3\},I_1\}+\{\{I_3,I_1\},I_2\}=0$ (Jacobi 恒等式). (6.16)

此外, 任意 $I(z):R^{2n}\to R$, 如果满足

$$I(g_H^t z)=I(z),\quad \forall t\in R,\ \ z\in R^{2n},$$

则称 $I(z)$ 是系统 (6.1) 的一个积分不变量 (又称首次积分).

定理 6.1 $I: R^{2n} \to R$ 为哈密顿系统 (6.1) 的积分不变量的充分必要条件是 $\{I,H\}=0$. 因 $\{H,H\}=0$, 所以哈密顿函数 $H(z)$ 本身就是 (6.1) 的一个积分不变量.

本节内容选自 V. I. Arnold 的专著 ([65]).

§6.2 非线性 Schrödinger 方程的一个保结构的有限元近似

薛定谔方程来源于量子力学, 是 1926 年由物理学家 E. Schrödinger 建立的. 理论物理学家试图通过求解高维线性薛定谔方程的本征值问题以及依赖于时间的演化问题去探索物质的原子、分子结构.

本节讨论如下形式的一维非线性薛定谔方程 (简称 NLS 方程):

$$i\dot{u}_t + \frac{\sigma}{2}u_{xx} + |u|^2 u = 0, \tag{6.17}$$

其中 $i=\sqrt{-1}$, u_t, u_{xx} 表示函数 (复值)$u(x,t)$ 对相应自变数 t 和 x 的偏导数, $|u|^2=u\overline{u}$. 在光纤通信中, 方程 (6.17) 描述信息波 (光孤子) 沿光纤的传播过程, σ 为色散系数, 于此假定它是一个常数. 在这节中, 我们从此方程的哈密顿形式出发, 用有限元逼近的方法建立一个可用于计算 NLS 方程孤波解的保结构数值方法.

首先要建立 NLS 方程 (6.1) 的哈密顿形式. 从 §6.1 的讨论看到, 一个哈密顿系统由 3 个要素 $(M,H,\{\cdot,\cdot\})$ 构成: M 为系统的相空间 (可以是向量空间, 也可以是某一光滑流形), H 为哈密顿函数 (泛函): $M\to R$, 而 $\{\cdot,\cdot\}$ 则是定义在函数集合 $\{I: M\to R\}$ 上的一种运算 (它满足条件 (6.14)~(6.16), 称为 Piosson 括号). 相应于 $(M,H,\{\cdot,\cdot,\})$ 的哈密顿系统为

$$\dot{z}=\{z,H\}=J(z)(\nabla H)^{\top}, \tag{6.18}$$

其中 $J(z)$ 满足 $\{I,G\}=(\nabla I)^{\top}J(z)(\nabla G)$, 因 $\{I,G\}=-\{G,I\}$, 故知 $J(z)^{\top}=-J(z)$.

对于 NLS 方程 (6.17), 设求解区间为: $-L\le x\le L$, 此时相空间 M 取为复值函数空间

$$V=\{v(x)\in \overline{H}^1([-L,L]): v(-L)=v(L)=0\}, \tag{6.19}$$

哈密顿函数则为如下积分泛函

$$H(u,\overline{u})=\int_{-L}^{L}\frac{1}{2}[\sigma u_x\overline{u}_x-(u\overline{u})^2]\,\mathrm{d}x, \quad \forall u\in V. \tag{6.20}$$

这里, Poisson 括号运算定义为

$$\{F,G\}=\frac{\delta F}{\delta\overline{u}}(-i)\frac{\delta G}{\delta\overline{u}}, \quad \forall F,G: V\to R. \tag{6.21}$$

计算 $H(u,\overline{u})$ 关于 $\overline{u}$ 的一次变分，求出

$$\frac{\delta H}{\delta \overline{u}} = -\frac{\sigma}{2}u_{xx} - |u|^2 u,$$

从而得到 $u(\cdot,t)$ 的演化方程:

$$\frac{\delta u}{\delta t} = \{\overline{u}, H\} = -i\,\frac{\delta H}{\delta \overline{u}}, \tag{6.22}$$

此即 NLS 方程 (6.17) 的哈密顿形式. 可见， NLS 方程实属无穷维哈密顿系统，它与 §6.1 所介绍的有限维哈密顿系统具有同样的几何性质.

下面讨论 NLS 方程的有限元近似.

令 $h = \dfrac{L}{N}$, 在 x 轴上作等距分布节点: $x_j = jh$, $j = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$, 利用三次样条函数

$$\phi(x) = \begin{cases} 0, & x \le -2, \\ \dfrac{1}{6}(x+2)^3, & -2 < x \le -1, \\ -\dfrac{1}{6}(3x^3 + 6x^2 - 4), & -1 < x \le 0, \\ \dfrac{1}{6}(3x^3 - 6x^2 + 4), & 0 < x \le 1, \\ -\dfrac{1}{6}(x-2)^3, & 1 < x \le 2, \\ 0, & x > 2, \end{cases} \tag{6.23}$$

构造函数族:

$$\phi_j(x) = \phi\left(\frac{x - x_j}{h}\right), \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots.$$

现在，以 $\{\phi_j(x)\}$ 为基函数，按插值法构造 $V = \overline{H}\,{}_0^1(\,[-L,L]\,)$ 的一个有限维子空间，记为 V_h.

方程 (6.22) 的弱形式为: 求 $u(\cdot,t) \in V$, 使得

$$\begin{gathered} i(u_t, v) - \frac{\sigma}{2}(u_x, v_x) + (|u|^2 u, v) = 0, \\ \forall v \in V\ ,\ t > 0. \end{gathered} \tag{6.24}$$

基于子空间 V_h, NLS 方程 (6.17) 的有限元近似为: 求 $u_h(\cdot,t) \in V_h$, 使得

$$\begin{gathered} i\ (u_{h,t}, v_h) - \frac{\sigma}{2}(u_{h,x}, v_{h,x}) + (|u_h|^2 u_h, v_h) = 0, \\ \forall v_h \in V_h\ . \end{gathered} \tag{6.25}$$

注意， (6.24) 和 (6.25) 中的内积 $(\cdot\,,\cdot)$ 均为复值函数空间中的复内积.

设空间 V_h 的基函数为 $\{\phi_j(x)\}_{j=-N_h}^{N_h}$，并设

$$u_h(x,t)=\sum_{j=-N_h}^{N_h}\alpha_j(t)\phi_j(x), \tag{6.26}$$

则 (6.25) 等价于

$$\begin{aligned}\sum_{j=-N_h}^{N_h}\Bigg\{ i\,\frac{\mathrm{d}\alpha_j(t)}{\mathrm{d}t}\,\left(\phi_j,\phi_k\right)-\frac{\sigma}{2}\alpha_j(t)\,\left(\phi_{j,x}\,,\phi_{k,x}\right)\\ +\alpha_j(t)\left(\left|\sum_{l=-N_h}^{N_h}\alpha_l\phi_l\right|^2\phi_j\;,\;\phi_k\right)\Bigg\}=0,\\ k=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm N_h.\end{aligned} \tag{6.27}$$

记 $(\phi_j,\phi_k)=m_{jk}$，$\left(\phi_{j,x}\,,\phi_{k,x}\right)=a_{jk}$，和 $M=(m_{jk})$，$A=(a_{jk})$. 经过计算，矩阵 M 和 A 的元素为

$$m_{jk}=h\cdot\begin{cases}151/315\\ 397/1680\\ 1/42\\ 1/5040\\ 0\end{cases},\quad a_{jk}=\frac{1}{h}\cdot\begin{cases}2/3 & j=k,\\ -1/8 & j=k\pm1,\\ -1/5 & j=k\pm2,\\ -1/120 & j=k\pm3,\\ 0 & \text{其余情形},\end{cases}$$

全离散格式：设 $\Delta t>0$ 为时间步长，$t_n=n\Delta t, n=0,1,2\cdots$，采用修正的中点差分逼近，可得 NLS 方程的如下全离散格式：

$$\begin{aligned}\frac{i}{\Delta t}(u_h^{n+1}-u_h^n,v_h)-\frac{\sigma}{2}\left(\frac{u_{h,x}^{n+1}+u_{h,x}^n}{2},v_{h,x}\right)\\ \left(\frac{|u_h^{n+1}|^2+|u_h^n|^2}{2}\,\frac{u_h^{n+1}+u_h^n}{2}\;,\;v_h\right)=0\;,\quad\forall v_h\in V_h.\end{aligned} \tag{6.28}$$

定理 6.2 设 $\{u_h^n\}$ 为全离散格式 (6.28) 的解，则有：

$$(u_h^n,u_h^n)=(u_h^0,u_h^0)\;,\quad\forall\, n\geq1,\qquad(\text{质量守恒}); \tag{6.29}$$

$$\begin{aligned}H(u_h^n)=\frac{\sigma}{2}(u_{h,x}^n,u_{h,x}^n)-\frac{1}{2}(|u_h^n|^2u_h^n,u_h^n)=H(u_h^0)\\ \forall\, n\geq1,\qquad(\text{能量守恒}).\end{aligned} \tag{6.30}$$

证明 首先，在 (6.28) 中取 $v_h = \dfrac{u_h^{n+1} + u_h^n}{2}$ 并在等式两端取虚部，可得

$$(u_h^{n+1} - u_h^n\,,\ u_h^{n+1} + u_h^n) = (u_h^{n+1}, u_h^{n+1}) - (u_h^n, u_h^n) = 0,$$

从而

$$(u_h^n, u_h^n) = (u_h^{n-1}, u_h^{n-1}) = \cdots = (u_h^0, u_h^0).$$

再在 (6.28) 中取 $v_h = u_h^{n+1} - u_h^n$ 并在两端取实部，即知

$$\frac{\sigma}{2}\left(u_{h,x}^{n+1} + u_{h,x}^n, u_{h,x}^{n+1} - u_{h,x}^n\right) - \frac{1}{2}\Big(\big(|u_h^{n+1}|^2 + |u_h^n|^2\big)(u_h^{n+1} + u_h^n)\,,$$
$$u_h^{n+1} - u_h^n\Big) = 0,$$

化简之后即知 (6.30) 也成立.

算例 计算 NLS 方程

$$i\,u_t + u_{xx} + |u|^2 u = 0 \tag{6.31}$$

的下述孤波解：

(1) 单孤立波

$$u(x,0) = \mathrm{sech}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)\exp\left(i\frac{x}{2}\right); \tag{6.32}$$

(2) 双孤立波

$$u(x,0) = \mathrm{sech}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)\exp\left(i\frac{x}{2}\right) + \mathrm{sech}\left[\frac{1}{2}(x-25)\right]\exp\left(i\frac{0.1}{2}x\right). \tag{6.33}$$

以上两种情形的计算结果见图 6.1 至 6.4. 图 6.1 、 6.2 是单孤立波的传播，图 6.3 、 6.4 是双孤立波的碰撞过程.

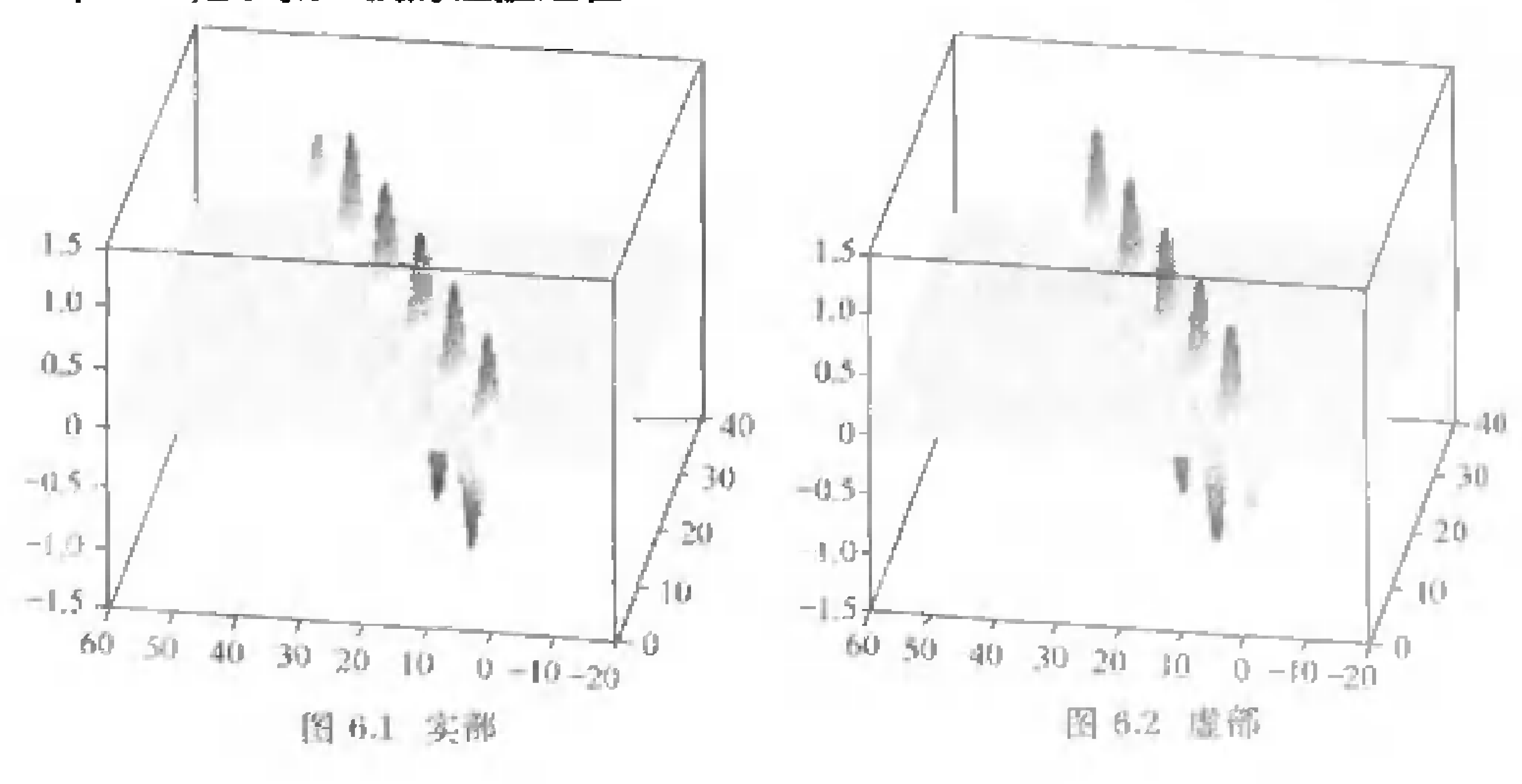


图 6.1 实部　　图 6.2 虚部

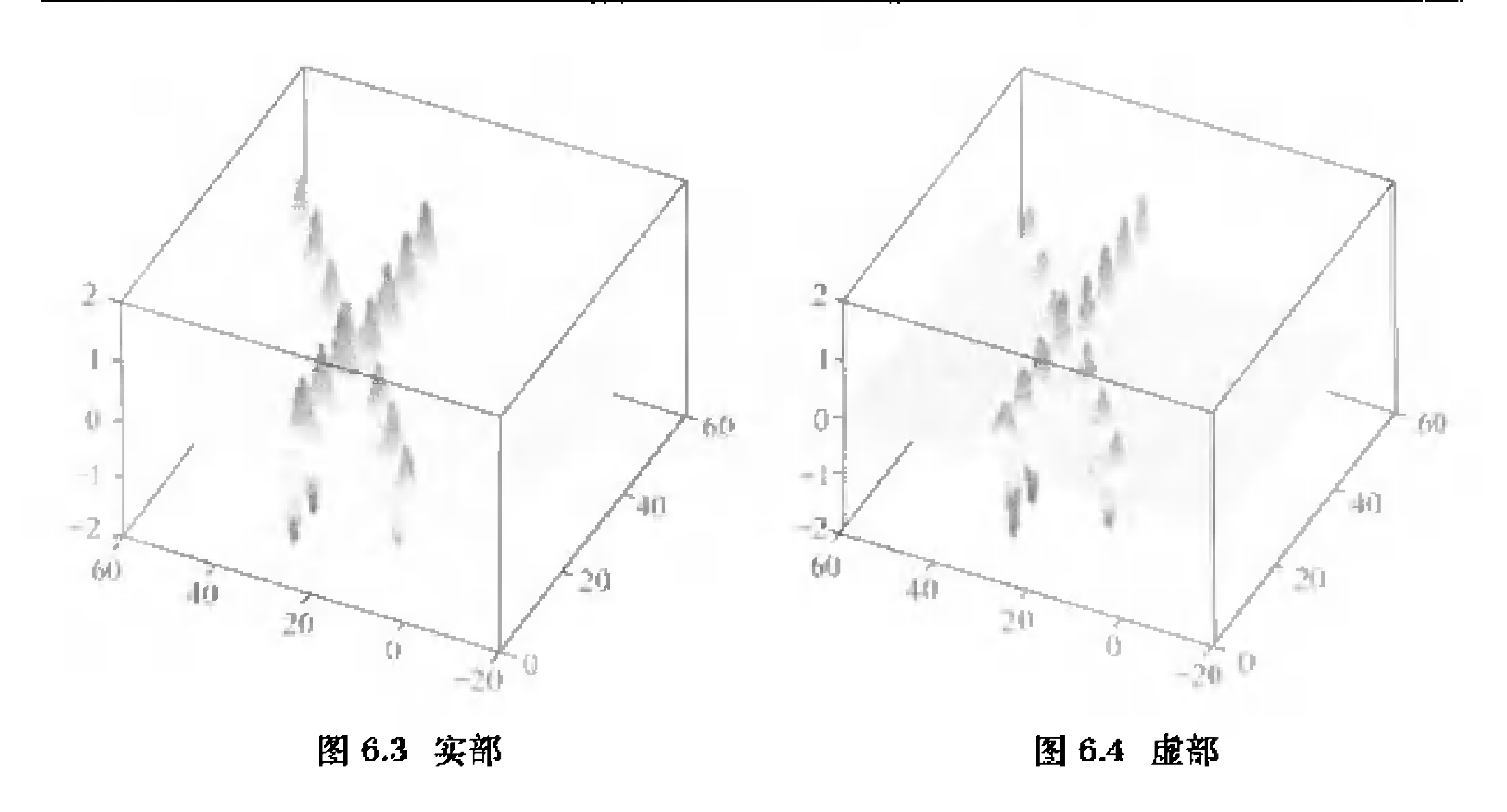


图 6.3 实部　　　　图 6.4 虚部

本节内容选自 [76], [76] 同时给出了半离散与全离散近似解的收敛性和误差估计的理论分析结果.

§6.3 Sine-Gordon 方程的多辛算法

近几年来, J. E. Marsden 等人 ([73], 1999) 提出了将辛几何算法推广到 Hamiltonian P.D.E 的另一途径, 称为 "多辛算法". 此算法的建立是基于将 Hamiltonian P.D.E 转化为一类局部的辛形式, 又称多辛形式 (multi-symplectic formulation). 本节以 Sine-Gordon 等非线性波动方程为例, 对这类方法作一简单介绍.

考虑如下形式的一维非线性波动方程

$$u_{tt} - u_{xx} + V'(u) = 0\ , \qquad -L < x < L, \tag{6.34}$$

其中 $V(\cdot) : R \to R$ 是某一光滑函数. 特例: $V(u) = -\cos u$, 此时 (6.34) 为 Sine-Gordon 方程

$$u_{tt} - u_{xx} + \sin u = 0. \tag{6.35}$$

若引用泛函 (哈密顿函数)

$$H(u,v) = \int_{-L}^{L} \left(\frac{1}{2}v^2 + \frac{1}{2}u_x^2 + V(u)\right) \mathrm{d}x, \tag{6.36}$$

则可将方程 (6.34) 转化为哈密顿形式

$$\begin{cases} u_t = \dfrac{\delta H}{\delta v} = v, \\ v_t = -\dfrac{\delta H}{\delta u} = u_{xx} - V'(u), \end{cases} \tag{6.37}$$

此系统相空间的辛结构由下式定义

$$\overline{\omega} = \int_{-L}^{L} \mathrm{d}v \wedge \mathrm{d}u \, \mathrm{d}x. \tag{6.38}$$

基于表达形式 (6.36)~(6.38), 可按 §6.2 中的方法建立非线性波动方程 (6.34) 的辛算法, 即将问题 (6.37) 直接转化为哈密顿型常微分方程组.

下面着重介绍多辛算法是如何构造的.

针对求解非线性波动方程 (6.34), 引进新变量 $v = u_t$, $w = u_x$, 并定义

$$S(Z) = \frac{1}{2}(v^2 - w^2) + V(u) \ , \ Z = (u, v, w)^{\top}, \tag{6.39}$$

则 (6.34) 转化为如下一阶偏微分方程组

$$M\partial_t Z + K\partial_x Z = \nabla_Z S(Z) \ , \ Z \in R^3, \tag{6.40}$$

其中

$$M = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad K = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{6.41}$$

在 [73] 中称形如 (6.40) 的方程组为 **多辛形式**, 其主要特征是系数矩阵 M 和 K 皆为反对称矩阵 (允许是奇异的).

定义二次形式 $\omega = \mathrm{d}v \wedge \mathrm{d}u$(与 (6.38) 所定义的 $\overline{\omega}$ 比较, ω 属 $\overline{\omega}$ 的局部形式), 则

$$\frac{\partial}{\partial t}\omega = \mathrm{d}v_t \wedge \mathrm{d}u + \mathrm{d}v \wedge \mathrm{d}u_t, \tag{6.42}$$

其中 $\mathrm{d}u$ 和 $\mathrm{d}v$ 满足变分方程

$$\begin{aligned} \mathrm{d}u_t &= \mathrm{d}v, \\ \mathrm{d}v_t &= \mathrm{d}u_{xx} - V''(u)\mathrm{d}u. \end{aligned} \tag{6.43}$$

将 (6.43) 代入 (6.42) 后, 得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\omega &= (\mathrm{d}u_{xx} - V''(u)\mathrm{d}u) \wedge \mathrm{d}u + \mathrm{d}v \wedge \mathrm{d}v \\ &= \mathrm{d}u_{xx} \wedge \mathrm{d}u = \frac{\partial}{\partial x}(\mathrm{d}u_x \wedge \mathrm{d}u). \end{aligned} \tag{6.44}$$

令 $\kappa = \mathrm{d}u \wedge \mathrm{d}w$, 其中 $w = u_x$. 由 (6.44), (ω, κ) 满足如下守恒型方程

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial \kappa}{\partial x} = 0 \ . \tag{6.45}$$

沿 (x,t) 平面的任意闭合曲线 Γ 积分上式，可得

$$\int_{\Gamma}(\omega \mathrm{d}x-\kappa \mathrm{d}t)=0, \tag{6.46}$$

此式准确的表明方程 (6.40) 于其相空间 (u,v,w) 中的几何特征.

多辛算法就是通过多辛形式 (6.40) 的离散化来建造计算格式的，并要求所得格式 (近似方程) 具有类似于 (6.45) 的守恒性质. 在波动方程 (6.34) 情形，(6.40) 的具体 (分量) 形式为

$$\begin{cases}\partial_t u=v\ ,\\ \partial_x u=w\ ,\\ \partial_t v-\partial_x w=-V'(u)\ .\end{cases} \tag{6.47}$$

在文献 [74] 中，对于空间和时间变量分别采用 s 级和 r 级的 Runge-Kutta 方法将 (6.47) 离散化，并证明：当选用的 Ruange-Kutta 法属于 Gauss-Legendre 型配置法时，所建立的离散模型是保持辛结构的，即满足类似于 (6.45) 的离散守恒方程. 现将离散过程简述如下.

空间变量离散化

用节点集 $\{x_k\}_{k=1}^{M}$ 代替空间变量的区间 $[-L,L]$, $\Delta x=x_{k+1}-x_k$, $u_k(t)$ 代表 $u(x_k,t)$ 的近似值. 将 (6.47) 的第 2, 3 两式写成

$$\begin{cases}\partial_x u=w,\\ \partial_x w=\partial_t v+V'(u).\end{cases} \tag{6.48}$$

应用 s 级隐型 Runge-Kutta 方法 $\{(a_{ij}),(b_i)\}$ 求解 (6.48), 计算公式为

$$\begin{cases}U_i=u_k+\Delta x\sum\limits_{j=1}^{s}a_{ij}W_j,\\ W_i=w_k+\Delta x\sum\limits_{j=1}^{s}a_{ij}\big(\partial_t V_j+V'(U_j)\big),\\ u_{k+1}=u_k+\Delta x\sum\limits_{i=1}^{s}b_iW_i,\\ w_{k+1}=w_k+\Delta x\sum\limits_{i=1}^{s}b_i\big(\partial_t V_i+V'(U_i)\big)\end{cases} \tag{6.49}$$

其中 $(U_i,W_i)_{i=1}^{s}$ 为过渡值，a_{ij},b_i 是所选 R-K 方法的系数. (6.49) 是方程 (6.48) 在 $x=x_k$ 点的一个半离散近似.

再来检验离散方程 (6.49) 是否具有守恒性质. 为此, 考虑它的变分方程

$$\begin{cases} \mathrm{d}U_i = \mathrm{d}u_k + \Delta x \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\mathrm{d}W_j, \\ \mathrm{d}W_i = \mathrm{d}w_k + \Delta x \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\left(\partial_t \mathrm{d}V_j + V''\mathrm{d}U_j\right), \\ \mathrm{d}u_{k+1} = \mathrm{d}u_k + \Delta x \sum_{i=1}^{s} b_i \mathrm{d}W_i, \\ \mathrm{d}w_{k+1} = \mathrm{d}w_k + \Delta x \sum_{i=1}^{s} b_i\left(\partial_t \mathrm{d}V_i + V''\mathrm{d}U_i\right). \end{cases} \tag{6.50}$$

由 (6.50) 的第 3, 4 两式, 有

$$\begin{aligned} &\mathrm{d}u_{k+1} \wedge \mathrm{d}w_{k+1} \\ &= \left(\mathrm{d}u_k + \Delta x \sum_{i=1}^{s} b_i \mathrm{d}W_i\right) \wedge \left(\mathrm{d}w_k + \Delta x \sum_{i=1}^{s} b_i(\partial_t \mathrm{d}V_i + V''\mathrm{d}U_i)\right) \\ &= \mathrm{d}u_k \wedge \mathrm{d}w_k + \mathrm{d}u_k \wedge \Delta x \sum_{i=1}^{s} b_i(\partial_t \mathrm{d}V_i + V''\mathrm{d}U_i) \\ &+\Delta x \sum_{i=1}^{s} b_i \mathrm{d}W_i \wedge \mathrm{d}w_k + \Delta x^2 \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{s} b_i b_j \mathrm{d}W_i \wedge (\partial_t \mathrm{d}V_j + V''\mathrm{d}U_j)\ . \end{aligned}$$

再利用 (6.50) 的第 1, 2 两式, 经过整理得到

$$\begin{aligned} \mathrm{d}u_{k+1} \wedge \mathrm{d}w_{k+1} &= \mathrm{d}u_k \wedge \mathrm{d}w_k + \Delta x \sum_{j=1}^{s} b_i \mathrm{d}U_i \wedge \partial_t \mathrm{d}V_i \\ &+\Delta x^2 \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{s}(b_i b_j - b_j a_{ji} - b_i a_{ij})\mathrm{d}W_i \wedge (\partial_t \mathrm{d}V_j + V''\mathrm{d}U_j)\ . \end{aligned}$$

当 R-K 方法 $\{(a_{ij}),(b_i)\}$ 选为 Gauss-Legendre 型配置法时, 系数 a_{ij}, b_i 满足

$$b_j a_{ji} + b_i a_{ij} - b_i b_j \equiv 0, \qquad i,j = 1,2,\cdots,s, \tag{6.51}$$

此时半离散模型 (6.49) 满足如下守恒方程

$$(\mathrm{d}u_{k+1} \wedge \mathrm{d}w_{k+1} - \mathrm{d}u_k \wedge \mathrm{d}w_k) - \sum_{i=1}^{s} b_i(\mathrm{d}U_i \wedge \partial_t \mathrm{d}V_i)\Delta x = 0. \tag{6.52}$$

显而易见, (6.52) 是前面介绍过的连续型守恒方程 (6.45) 的一个离散形式.

时间变量离散化

设 $\Delta t>0$ 为时间步长，$t_n=n\Delta t, u_k^n$ 代表 $u(x_k,t_n)$ 的近似值. 下面在时间区间 $[0,\Delta t]$ 上进行时间变量的离散化，为表述简单不妨设 $k=0$, 即仅仅写出 $x=x_0$ 点的公式，其余节点的公式可以类推. 在这一步，目的是建立 (6.47) 中第一个方程 $\partial_t u=v$ 和 (6.49) 中 $\partial_t V_j, j=1,2,\cdots,s$ 的离散方程和计算公式. 为此利用 r 级 Runge-Kutta 方法 $\{(\widetilde{a}_{ij}),(\widetilde{b}_i)\}$, 建立如下近似方程

$$\begin{cases} U_{i,m}=u_i^0+\Delta t\sum\limits_{l=1}^{r}\widetilde{a}_{ml}V_{i,l}, \\ V_{i,m}=v_i^0+\Delta t\sum\limits_{l=1}^{r}\widetilde{a}_{ml}\partial_t V_{i,l}, \\ u_i^1=u_i^0+\Delta t\sum\limits_{m=1}^{r}\widetilde{b}_m V_{i,m}, \\ v_i^1=v_i^0+\Delta t\sum\limits_{m=1}^{r}\widetilde{b}_m\partial_t V_{i,m} \end{cases} \tag{6.53}$$

其中引用记号

$$U_{i,m}\approx u(c_i\Delta x, d_m\Delta t)\ ,\qquad V_{i,m}\text{的意义类似}$$

$$u_i^m\approx u(c_i\Delta x, d_m\Delta t)\ ,\qquad v_i^m\text{的意义类似}$$

$$c_i=\sum_{j=1}^{s}a_{ij}\ ,\qquad d_m=\sum_{l=1}^{r}a_{ml}$$

$$\partial_t V_{i,m}\approx\partial_t V_i(d_m\Delta t).$$

这里，仍然假定 R-K 格式 $\{(\widetilde{a}_{ij}),(\widetilde{b}_i)\}$ 为 Gauss-Legendre 配置法，通过类似于半离散情形的推演过程，可得到如下离散形式的守恒方程

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{s}b_i(\mathrm{d}u_i^1\wedge\mathrm{d}v_i^1-\mathrm{d}u_i^0\wedge\mathrm{d}v_i^0)\,\Delta\,x \\ &\quad-\sum_{m=1}^{r}\widetilde{b}_i(\mathrm{d}u_1^m\wedge\mathrm{d}w_1^m-\mathrm{d}u_0^m\wedge\mathrm{d}v_0^m)\,\Delta\,t=0. \end{aligned} \tag{6.54}$$

综合以上两步近似，求解非线性波动方程 (6.34) 的 Gauss-Legendre 型 R-K 格

式为

$$
\begin{aligned}
&U_{i,m} = u_0^m + \Delta x \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\partial_x U_{j,m},\\
&W_{i,m} = w_0^m + \Delta x \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\partial_x W_{j,m},\\
&u_1^m = u_0^m + \Delta x \sum_{i=1}^{s} b_i\partial_x U_{i,m},\\
&w_1^m = w_0^m + \Delta x \sum_{i=1}^{s} b_i\partial_x W_{i,m},\\
&U_{i,m} = u_i^0 + \Delta t \sum_{l=1}^{r} \widetilde{a}_{ml}\partial_t U_{i,l},\\
&V_{i,m} = v_i^0 + \Delta t \sum_{l=0}^{r} \widetilde{a}_{ml}\partial_t V_{i,l},\\
&u_i^1 = u_i^0 + \Delta t \sum_{m=1}^{r} \widetilde{b}_m\partial_t U_{i,m},\\
&v_i^1 = v_i^0 + \Delta t \sum_{m=1}^{r} \widetilde{b}_m\partial_t V_{i,m},\\
&\partial_t U_{i,m} = V_{i,m},\ \partial_x U_{i,m} = W_{i,m},\\
&\partial_t V_{i,m} - \partial_x W_{i,m} = -V'(U_{i,m}).
\end{aligned}
\tag{6.55}
$$

算例 考虑 Sine-Gordon 方程*

$$
\partial_{tt}u - \partial_{xx}u + \sin u = 0,\ \ -L < x < L. \tag{6.56}
$$

1) 假定周期边值条件: $u(-L,t) = u(L,t)$ 和 $L = 100$, 求满足如下初值条件的解:

$$
u(x,0) = 4\arctan\frac{e^{x-L/6}}{\sqrt{1-\beta^2}} + 4\arctan\frac{e^{-x-L/6}}{\sqrt{1-\beta^2}}, \tag{6.57}
$$

$$
\begin{aligned}
\partial_t u(x,0) = \ & \frac{\partial}{\partial t}\Bigg[4\arctan\frac{e^{x-L/6-\beta t}}{\sqrt{1-\beta^2}}\\
&+4\arctan\frac{e^{-x-L/6-\beta t}}{\sqrt{1-\beta^2}}\Bigg]_{t=0}.
\end{aligned}
\tag{6.58}
$$

用 Gauss-Legendre 型 R-K 方法 ($r = 1, s = 2$) 计算, 令 $\beta = 0.5, M = 100, \Delta t = 0.1$. 计算结果见 [74].

2) 用差分法和本节的多辛算法计算方程 (6.56) 的呼吸波 (breather) 解

$$
u(x,t) = 4\arctan\frac{\sqrt{1-w^2}}{w}\left(\frac{\cos wt}{\cosh(x\sqrt{1-w^2})}\right). \tag{6.59}
$$

令 $w = 0.9,\ L = 100$. 计算结果见 [74].

*) 利用变换 $x=\xi+\tau$, $t=\tau-\xi$, 方程 (6.56) 又可写成 $\dfrac{\partial^2 u}{\partial\tau\partial\xi}=\sin u$. 这一形式方程在将一 Lobachevskii 平面嵌入三维欧氏空间的问题中遇到.

§6.4 Korteweg de Vries 方程孤立波解的数值模拟方法

D. J. Korteweg 和 G. de Vries 为描述渠道中流体表面波提出如下形式的非线性波动方程 (简称 KdV 方程):

$$\frac{\partial u}{\partial t}-3\frac{\partial}{\partial x}(u^2)+\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}=0. \tag{6.60}$$

在 1965 年, N. J. Zabusky 和 M. D. Kruskal[79] 根据他们的数值模拟计算发现 KdV 方程的孤立波 (soliton) 解并得出结论: KdV 方程中的孤立波允许弹性碰撞, 这一结论激发了系列关于非线性波动方程的新的解析研究 (如可积系统、逆散射方法). 寻找孤立波解的有效数值模拟方法亦成为发展方程数值方法研究中的一个重要课题. 由于保结构算法具有良好的保 (几何) 结构和守恒性质, 所以可以期望并已在许多数值试验中显示出这种算法用于孤立波的数值模拟是非常有效的. 本节介绍构造 KdV 方程保结构算法的一种途径: Petrov-Galerkin 有限元近似.

KdV 方程的哈密顿形式

考虑方程 (6.60) 的周期边界条件问题, 即设 $u(x+1,t)=u(x,t)$. 引进函数空间

$$H_p^m=\{v(x)\in H^m(R): v^{(i)}(x+1)=v^{(i)}(x),\quad i=0,1,\cdots,m.\} \tag{6.61}$$

和积分泛函: $H_p^m\to R(m\geq 1)$

$$H(u)=\int_0^1\left(\frac{1}{2}u_x^2+u^3\right)\mathrm{d}x,\ \forall u\in H_p^m. \tag{6.62}$$

由

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}H(u+\lambda\delta u)\right]_{\lambda=0}=0,\forall\delta u$$

可求出 H 的一次变分

$$\frac{\delta H}{\delta u}=3u^2-u_{xx}, \tag{6.63}$$

因此可将 (6.60) 改写为

$$\frac{\partial u}{\partial t}=J\frac{\delta H}{\delta u},\quad J=\frac{\partial}{\partial x}. \tag{6.64}$$

此即 KdV 方程的哈密顿形式, H 为其哈密顿函数. 引进 Poisson 括号运算:

$$\{F,G\}=\int_0^1\left(\frac{\delta F}{\delta u}J\frac{\delta G}{\delta u}\right)\mathrm{d}x,\quad \forall F,G:H_p^m\to R. \tag{6.65}$$

对于 (6.64) 的任一解 $u=u(x,t)$, 有

$$\frac{\mathrm{d}H(u)}{\mathrm{d}t}=\int_0^1\frac{\delta H}{\delta u}\frac{\partial u}{\partial t}\mathrm{d}x=\int_0^1\frac{\delta H}{\delta u}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\delta H}{\delta u}\mathrm{d}x=0,$$

可见,

$$H(u(x,t))=常数,\quad \forall t \qquad (能量守恒). \tag{6.66}$$

此外, 如果 $I(u):H_p^m\to R$ 满足

$$\{I,H\}=0,\quad (I(u)与H(u)是“对合”的)$$

则 $I(u)$ 也是方程 (6.65) 的守恒量 (又称首次积分). 事实上, KdV 方程具有无穷多个守恒量 (见 [65]), 例如

$$I_0(u)=\int_0^1 u\mathrm{d}x,\ I_1(u)=\int_0^1 u^2\mathrm{d}x,\ I_3(u)=H(u),\cdots. \tag{6.67}$$

Petrov-Galerkin 有限元近似

设 $0=x_0\le x_1\le\cdots\le x_N=1$ 是区间 $I=[0,1]$ 的一个剖分. 记 $I_j=[x_{j-1},x_j]$, $h=\max\limits_{1\le j\le N}(x_j-x_{j-1})$. 给定整数 $r\ge 2$, 引进如下有限维函数空间

$$V_h=\{v\in H_p^1: v|_{I_j}\in P_r(I_j),\ j=1,2,\cdots,N\},$$
$$W_h=\{w\in H_p^2: w|_{I_j}\in P_{r+1}(I_j),\ j=1,2,\cdots,N\}$$

其中 $P_r(I_j)$ 代表 I_j 上所有次数 $<r$ 的多项式集合. 不难看出 $\dim V_h=\dim W_h=(r-1)N$.

利用子空间 V_h 和 W_h, KdV 方程 (6.60) 的 P-G 有限元近似定义为: 求映射 $u^h(t):R^+\to V_h$ 使得

$$(u_t^h,w^h)+3((u^h)^2,w_x^h)+(u_x^h,w_{xx}^h)=0,\quad \forall w^h\in W_h, \tag{6.68}$$

其中 $(\cdot,\cdot)$ 代表 $L^2(I)$ 中内积.

下面对于上述 P-G 有限元近似的结构与守恒性质进行一些分析. 为此, 引进如下线性积分算子 $G:H_p^m\to H_p^{m+1}$, 它由下式定义

$$(Gf)_x=f-f^0,\quad (Gf)^0=f^0,\quad \forall f\in H_p^m. \tag{6.69}$$

其中 $f^0=(f,1)$ 代表函数 f 在 $I=[0,1]$ 上的平均值, 其实 $Gf(x)$ 具有如下表达式:

$$(Gf)(x)=\int_0^x f(y)\mathrm{d}y-f^0x+\frac{3}{2}f^0-\int_0^1\int_0^x f(y)\mathrm{d}y\mathrm{d}x.$$

根据 G 的定义，成立

$$(Gf_1,f_2)=\big(Gf_1,(Gf_2)_x\big)+f_1^0f_2^0, \tag{6.70}$$

$$(Gf,f)=(f^0)^2. \tag{6.71}$$

若令 $\overset{\circ}{H}{}_p^m=\{v\in H_p^m: v^0=0\}$ 和 $\overset{\circ}{V}_h=V_h\cap \overset{\circ}{H}{}_p^1$，则有

$$(Gf_1,f_2)=-(f_1,Gf_2),\quad \forall f_1,f_2\in \overset{\circ}{H}{}_p^m. \tag{6.72}$$

换句话说，G 是 $\overset{\circ}{H}{}_p^m$ 上的反对称算子，它是从 $\overset{\circ}{H}{}_p^m$ 到 $\overset{\circ}{H}{}_p^{m+1}$ 的 1-1 映射，并且 G 的逆算子恰为 $J=\dfrac{\partial}{\partial x}$. 容易说明半离散方程 (6.68) 为一常微分方程，下面要解释的是此方程确实是一个有限维哈密顿系统.

对任意 $u^h(x)\in V_h$，由下式可定义 (惟一地) 它的二阶离散微商 $(\partial_{xx}^h u^h)(x)\in V_h$:

$$(\partial_{xx}^h u^h,v^h)=-(u_x^h,v_x^h),\quad \forall v^h\in V_h. \tag{6.73}$$

因 $(\partial_{xx}^h u^h,1)=0$，知 $\partial_{xx}^h u^h\in\overset{\circ}{V}_h=V_h\cap \overset{\circ}{H}{}_p^1$. 现设 $u^h=u^h(t)$ 为方程 (6.68) 的解，因 $u_t^h,\partial_{xx}^h u^h\in\overset{\circ}{V}_h$，根据 (6.69) 和 (6.72) 知，$u^h(t)$ 满足如下等价方程

$$(Gu_t^h,v^h)-3\big((u^h)^2,v^h\big)+(\partial_{xx}^h u^h,v^h)=0,\quad \forall v^h\in\overset{\circ}{V}_h. \tag{6.74}$$

设 P_h 为从 $L^2(I)$ 到 $\overset{\circ}{V}_h$ 的射影算子，并令 $G_h=P_hG$，则对任意 f^h、$g^h\in\overset{\circ}{V}_h$，

$$(G_hf^h,g^h)=(P_hGf^h,g^h)=(Gf^h,g^h)=-(f^h,G_hg^h). \tag{6.75}$$

换句话说，G_h 是 $\overset{\circ}{V}_h$ 上的一个反对称算子. 用变分计算可验证 $\delta H(u^h)/\delta u^h=3P_h(u^h)^2-\partial_{xx}^h u^h$，从以上推演发现半离散方程 (6.68) 等价于

$$G_h(u^h)_t=3P_h(u^h)^2-\partial_{xx}^h u^h. \tag{6.76}$$

假定 $P_h\overset{\circ}{V}_h=\overset{\circ}{V}_h$，则 G_h 于 $\overset{\circ}{V}_h$ 的限制为 1-1 映射. 记 $J_h=G_h^{-1}$，它也是 $\overset{\circ}{V}_h$ 上的 1-1 映射. 至此，我们验证了：P-G 有限元近似即半离散方程 (6.68) 与下述哈密顿系统是等价的，

$$(u^h)_t=J_h\delta H(u^h)/\delta u^h,\quad J_h^{\top}=-J_h. \tag{6.77}$$

下述定理给出了半离散问题的守恒性质.

定理 6.3 半离散方程 (6.68) 的解 $u^h=u^h(t)$ 满足如下守恒律：

(i) $I_0\big(u^h(t)\big)=\displaystyle\int_0^1 u^h(x,t)\mathrm{d}x=$ 常数，$\forall t\geq 0$,

(ii) $H\big(u^h(t)\big)=\displaystyle\int_0^1\left[\frac{(u_x^h)^2}{2}+(u^h)^3\right]\mathrm{d}x=$ 常数，$\forall t\geq 0$.

证明 因 $1 \in W_h$, 在 (6.68) 中令 $w^h = 1$, 则有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^1 u^h(x,t)\mathrm{d}x = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(u^h,1) = (u_t^h,1) = 0,$$

故 (i) 成立. 为证 (ii), 在 (6.68) 中取 $w^h = Gu_t^h \in V_h$, 可得

$$(u_t^h, Gu_t^h) + 3\big((u^h)^2, (Gu_t^h)_x\big) + \big(u_x^h, (Gu_t^h)_{xx}\big) = 0.$$

因 $(u_t^h)^0 = (u_t^h,1) = 0$, $(u_t^h, Gu_t^h) = 0$ 和 $(Gu_t^h)_x = u_t^h$, 由上述方程和 (6.69)、(6.72) 即知

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}H(u^h(t)) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\{\big((u^h)^3,1\big) + \frac{1}{2}(u_x^h,u_x^h)\right\} = 0,$$

于是, (ii) 也得证.

关于 KdV 方程的 Petrov-Galerkin 有限元近似 (6.68) 是 R. Winther 在 [78](1980) 中首先提出的, 前面关于这一半离散模型的哈密顿几何结构和守恒性质的分析是本书著者在文献 [70](1991) 中给出的. 此外, 论文 [70] 还给出了半离散近似解按 $L^\infty(I)$ 范数的误差估计, 并证明当恰当选取初始近似 $u^h(0)$, 半离散近似解 $u_h(x,t)$ 在剖分节点处满足

$$|u(x_i,t) - u^h(x_i,t)| \le C(u)h^{2r-2}, \quad i = 1,2,\cdots,N. \tag{6.78}$$

其中 $u(x,t)$ 为 KdV 方程的足够光滑的精确解. 形如 (6.78) 的误差估计被称为"超收敛估计", 因为用试探函数空间 V_h(由次数 $< r$ 的分段多项式组成) 中元素近似任给的光滑函数的逼近阶一般地仅为 $O(h^r)$, 而 (6.78) 右端关于 h 的阶与逼近阶 $O(h^r)$ 比较, 高出 $r-2$ 阶.

算例 计算 KdV 方程

$$q_t + (1+q)q_x + \frac{d^2}{2}q_{xxx} = 0$$

的孤立波, 其初始条件为

$$q(x,0) = q_0 + a\mathrm{sech}^2\sqrt{\frac{a}{6d^2}}(x-0.5),$$

$$q_0 = -2d\sqrt{6a}\tanh\sqrt{\frac{a}{24d^2}}, \quad a = 0.2, \quad d = 10^{-2}.$$

计算结果见 [70].

第七章　非线性离散模型的稳定性和收敛性理论

微分方程的数值解法的基本思想，是将微分方程的定解问题通过某种途径 (差分逼近、有限元近似、谱逼近等) 转化为离散模型，并把离散模型的解当作连续模型 (原定解问题) 的近似解. 一个可用 (有效) 的数值方法应该是用它可以求得问题的任意指定精度的近似解，换句话说，它应具有收敛性. 此外，在离散模型的求解计算中，由于数值的舍入和原始数据不准确，使得实际算出的也不是离散模型的真解，而是带有某种扰动项的模型的解. 一个有实用价值的数值方法还应该具有能够控 (抑) 制扰动影响的性能，此即数值方法的稳定性.

稳定性和收敛性是微分方程数值解法理论研究中最为重要的内容. Courant, Friedrichs 和 Lewy ([80], 1928) 最早研究了差分法的收敛性，之后 Von Neumann、Richtmyer、Kreiss、Рябенький 等研究了差分格式的稳定性，在线性差分逼近模型情形发现了收敛性与稳定性之间的等价关系，著名的 Lax 定理证明了这一事实. 上述关于差分方法的理论研究工作已由 R. D. Richtmyer 和 K. W. Morton 在他们的专著 ([81], 1967) 中作了系统的归纳、总结.

近 30 年来，人们对于非线性离散模型的收敛性与稳定性问题十分关注，探讨是否能够在两者之间建立起一般性的关系，其时发现对于非线性模型要建立如同 Lax 定理那样的等价关系是非常困难的. 尽管由于非线性模型的复杂性，一个非常恰当的数值分析理论尚需时日才能建立，仍有许多著名数值分析学家 (如 H. J. Stetter、H. B. Keller、W. G. Strang 和郭本瑜等) 对于非线性离散模型的稳定性概念进行过深入的探究，提出了 “广义稳定性” 概念，并建立了若干保证离散模型近似解收敛的充分条件. 本章试图对这方面的理论研究成果作一简要的介绍.

§7.1　线性模型的 Lax 定理

Lax 定理可谓是差分方法理论中十分完美的结果，它将线性问题差分格式的理论分析归结为主要地是对于稳定性的研究，而收敛性则可由稳定性推断出. 这个定理是在 Banach 空间的框架下建立的，所以它具有充分的概括性和应用方面的广泛性.

设 $\mathcal{B}$ 是一 Banach 空间，其范数记为 $\|\cdot\|$. 另外 L 为 $\mathcal{B}$ 上的线性算子，其定义域为 $D(L)$. 考虑如下定解问题

$$\frac{\mathrm{d}u(t)}{\mathrm{d}t} = Lu(t), \quad 0 < t \leq T \tag{7.1}$$

$$u(0) = u^0 \in \mathcal{B}. \tag{7.2}$$

此问题的解为一单参数族 $u(t):[0,T]\to \mathcal{B}\cap D(L)$, 它满足条件: $u(0)=u^0$ 和

$$\lim_{\Delta t\to 0}\left\|\frac{u(t+\Delta t)-u(t)}{\Delta t}-Lu(t)\right\|=0. \tag{7.3}$$

假定 $\mathcal{D}$ 是空间 $\mathcal{B}$ 的如此子集, 使得对任意 $u^0\in\mathcal{D}$, 存在惟一函数 $u(t)\in\mathcal{B}$, 它在 $[0,T]$ 上一致地满足 (7.3). 于是存在线性算子 $E_0(t)$. 使得当 $u^0\in\mathcal{D}$ 时, $u(t)=E_0(t)u^0$ 就是问题 (7.1) 、(7.2) 的解. 如果下面两个条件成立:

(i) $\mathcal{D}$在$\mathcal{B}$中稠密;

(ii) 存在常数$C_0>0$,使得 $\|E_0(t)\|\ \le C_0$对所有 $t\in[0,T]$ 则称问题 (7.1) 、(7.2) 为适定的.

以下总假定问题 (7.1) 、(7.2) 为适定的. 于是根据泛函分析中的扩张定理 (Hahn 定理) 可将 $E_0(t)$ 扩张到全空间 $\mathcal{B}$, 记为 $E(t)$, 并且 $\|E(t)\|=\|E_0(t)\|$. 因此, 对任意 $u^0\in\mathcal{B}$ 均存在 $E(t)u^0$, $0\le t\le T$, 它被称为问题 (7.1) 、 (7.2) 的广义解. 显然, $E(t)$ 具有性质:

$$E(s)E(t)=E(s+t),\quad \forall\, 0\le s,t\le T. \tag{7.4}$$

另外, 由 (7.3) 可知: 对任意 $t\in[0,T]$

$$\|u(t+\Delta t)-u(t)\|\to 0,\ \text{当}\ \Delta t\to 0. \tag{7.5}$$

对于发展型偏微分方程而言, $\mathcal{B}$ 代表定义在某个空间区域 Ω 上的函数类. 抽象初值问题 (7.1) 、 (7.2) 可以是纯初值问题, 也可以是初边值问题, 但此时总假定边界条件是线性、齐次的, 并且每个 $u(t)\in\mathcal{B}$ 都满足此种边界条件.

现在讨论问题 (7.1) 、 (7.2) 的差分逼近.

设 $\Omega\subseteq R^d$, $x=(x_1,x_2,\cdots,x_d)$. 用 $h=(h_1,h_2,\cdots,h_d)$ 代表空间网格剖分的步长, $\tau>0$ 代表时间步长. 假定剖分满足条件: $h_m=g_m(\tau)$, 并且 $g_m(\tau)\to 0$ 当 $\tau\to 0$, $m=1,2,\cdots,d$. 记号 U^n 代表 $u(n\tau)$ 的近似值. 考虑如下形式的两层差分格式

$$A(\tau)U^{n+1}=B(\tau)U^n \tag{7.6}$$

其中 $A(\tau)$ 和 $B(\tau)$ 是不明显依赖于 t 的线性算子. 这里, 假定 $A(\tau)$ 和 $B(\tau)$ 关于 τ 连续, 并且 $A^{-1}(\tau)$ 存在. 令 $C(\tau)=A^{-1}(\tau)B(\tau)$, 则 (7.6) 可改写为

$$U^{n+1}=C(\tau)U^n. \tag{7.7}$$

设 $\mathcal{U}$ 是 (7.1) 、 (7.2) 的解的一个集合, 与 $\mathcal{U}$ 相应的初值的集合记为 $\mathcal{U}_0$, 假定 $\mathcal{U}_0$ 在 $\mathcal{B}$ 中稠密. 令

$$R_\tau(u(t))=\left(\frac{C(\tau)-I}{\tau}-L\right)u(t), \tag{7.8}$$

如果对任一 $u(t)\in\mathcal{U}$, 当 $\tau\to 0$ 时

$$\|R_\tau(u(t))\|\to 0,\ \text{关于}\ t\in[0,T]\text{一致} \tag{7.9}$$

则称 (7.6) 对于 (7.1) 的逼近是 **相容的**.

由相容性定义和 (7.3) 推出：当 $\tau \to 0$, 对所有 $t \in [0,T]$ 一致地有

$$\left\| \frac{u(t+\tau) - C(\tau)u(t)}{\tau} \right\| \to 0. \tag{7.10}$$

由 (7.7) 知

$$U^n = [C(\tau)]^n U^0. \tag{7.11}$$

如果对任意 $U^0 \in \mathcal{B}$ 和固定的 $t \in [0,T]$, 成立

$$\left\| [C(\tau)]^{\left[\frac{t}{\tau}\right]} U^0 - E(t)U^0 \right\| \to 0, 当\ \tau \to 0 \tag{7.12}$$

则称差分格式 (7.6) 是 **收敛的**. $\left[\dfrac{t}{\tau}\right]$ 代表与 $\dfrac{t}{\tau}$ 最接近的整数.

再来介绍稳定性的定义. 假定初值 U^0 有误差 δU^0, 由此引起格式的解有误差 δU^n. 如果存在正常数 τ_0 和 M, 使得当 $0 < \tau \le \tau_0$ 和 $0 < n\tau \le T$ 时，一致地有

$$\|\delta U^n\| \le M\|\delta U^0\| \tag{7.13}$$

则称格式 (7.6) 是 **关于初值按范数** $\|\cdot\|$ **稳定的**. 由于格式是线性的，故 $\delta U^n = [C(\tau)]^n \delta U^0$, 从而条件 (7.13) 又可改述为：存在正常数 M, 使得

$$\|[C(\tau)]^n\| \le M, \quad 对一切\ 0 < \tau \le \tau_0,\ 0 < n\tau \le T. \tag{7.14}$$

下述定理给出了离散格式收敛性与稳定性之间的关系.

定理 7.1 (Lax 定理 [81]) *假定定解问题 (7.1) 是适定的，并且格式 (7.6) 是 (7.1) 的相容逼近，则格式 (7.6) 为收敛的充分与必要条件是此格式是稳定的.*

证明 先证必要性. 假定格式 (7.6) 是收敛的，则对任意 $U^0 \in \mathcal{B}$, 存在正常数 $M(U^0)$, 使得

$$\|[C(\tau)]^n U^0\| \le M(U^0), \quad 对一切\ 0 < \tau < \tau_0,\ 0 < n\tau \le T.$$

假若不然，则可选取子列 $\{\tau_l\}$ 和 $\{n_l\}$, 使得当 $l \to \infty$ 时

$$\begin{aligned} &\tau_l \to 0, \quad n_l\tau_l \to t' \in [0,T], \\ &\|[C(\tau_l)]^{n_l} U^0\| \to \infty. \end{aligned} \tag{7.15}$$

但是，从收敛性可知

$$\|[C(\tau_l)]^{n_l} U^0 - E(t')U^0\| \to 0,$$

此与 (7.15) 矛盾，因此断言成立. 据此和 Banach 空间的一致有界定理，即知存在正常数 C_1, 使得

$$\|[C(\tau)]^n\| \le C_1, \ 对一切\ 0 < \tau < \tau_0,\ 0 < n\tau \le T.$$

必要性得证.

再证充分性，即证明稳定性蕴含收敛性.

先假定 $u(t) = E(t)U^0 \in \mathcal{U}$. 由 (7.10) 可知：对任意 $\varepsilon > 0$, 存在 τ_0 使得当 $0 < \tau < \tau_0$ 时,

$$\left\|[C(\tau) - E(\tau)]u(t)\right\| \le \varepsilon\tau.$$

若令

$$\begin{aligned} A_l &= [C(\tau_l)]^{n_l}U^0 - E(n_l\tau_l)U^0 \\ &= \sum_{r=0}^{n_l-1}[C(\tau_l)]^r[C(\tau_l) - E(\tau_l)]E[(n_l - 1 - r)\tau_l]U^0, \end{aligned}$$

则有

$$\|A_l\| \le C_1\sum_{s=0}^{n_l-1}\varepsilon\tau_l = C_1\varepsilon n_l\tau_l \le C_1\varepsilon T.$$

因此，当 $\tau_l \to 0$, $n_l\tau_l \to t$ 时， $\|A_l\| \to 0$.

假定 t 是 $[0,T]$ 中的任一值，可取 $t' = \min(t, n_l\tau_l)$. 记 $s = t - n_l\tau_l$, 由 $E(t)$ 的性质 (7.4) 得到

$$E(n_l\tau_l) - E(t) = \mp\left[E(|s|) - I\right]E(t'),$$

其中符号 " $\mp$" 由 s 的正负号决定，从而有

$$\left\|[E(n_l\tau_l) - E(t)]U^0\right\| \le \sup_{0\le t\le T}\|E(t)\| \cdot \left\|[E(|s|) - I]U^0\right\|.$$

显然上式右端当 $s \to 0$ 时是趋于零的. 所以，若 $u(t) \in \mathcal{U}$, $n_l\tau_l \to t$ 则

$$\left\|[C(\tau_l)]^{n_l}U^0 - E(t)U^0\right\| \to 0\ .$$

一般情形，设 $u(t)$ 是 (7.1) 的任意解，其初值为 U^0. 因 $\mathcal{U}_0$ 在 $\mathcal{B}$ 中稠密，故可选取序列 $U^0_{(\mu)} \in \mathcal{U}_0$, 使得当 $\mu \to \infty$ 时， $\|U^0_{(\mu)} - U^0\| \to 0$. 此时，我们有

$$\begin{aligned} [C(\tau_l)]^{n_l}U^0 - E(t)U^0 = &\left([C(\tau_l)]^{n_l} - E(t)\right)U^0_{(\mu)} \\ &+[C(\tau_l)]^{n_l}(U^0 - U^0_{(\mu)}) - E(t)(U^0 - U^0_{(\mu)}). \end{aligned}$$

因 $U^0_{(\mu)} \in \mathcal{U}_0$, 故当 $n_l\tau_l \to t$ 时，上式右端第一项趋于零，其余两项由算子 $[C(\tau_l)]^{n_l}$ 和 $E(t)$ 的有界性也是趋于零的，由此证明了格式是收敛的. 至此定理证毕.

§7.2 广义稳定性和收敛性条件

本节所关注的是非线性定解问题的离散模型的收敛性与稳定性问题. 目前，关于非线性微分方程数值方法的理论研究，主要地还是针对具体 (某类) 问题和特

定数值方法采用能量估计或其他分析工具进行的，由此难以得到具有足够概括性和普遍性的结果. 然而，正如本章开始所提及的，确有一些工作是在一般框架之下对离散逼近的理论问题开展研究的，并取得一些重要结果. 本节拟对此作一简单介绍.

设 $\mathcal{B}_1$ 和 $\mathcal{B}_2$ 是两个给定的 Banach 空间，其中范数分别记为 $\|\cdot\|_1$ 和 $\|\cdot\|_2$. L 是从 $\mathcal{B}_1$ 到 $\mathcal{B}_2$ 的算子 (非线性). 考虑如下算子方程

$$Lu = f. \tag{7.16}$$

对于给定 $f \in \mathcal{B}_2$, 假定存在 $u \in \mathcal{B}_1$, 它满足方程 (7.16), 并且在 u 的某个邻域内 (7.16) 没有其它的解 (即 u 为孤立解).

设 $\mathcal{B}_{1h}$ 和 $\mathcal{B}_{2h}$ 分别是 $\mathcal{B}_1$ 和 $\mathcal{B}_2$ 的有限维近似空间， r_{ih} 是从 $\mathcal{B}_i$ 到 $\mathcal{B}_{ih}$ 的限制算子， $i=1,2$. 假定 r_{ih} 为连续算子并满足

$$\lim_{h\to 0}\|r_{1h}u\|_1 = \|u\|_1, \qquad \text{对任意 } u \in \mathcal{B}_1, \tag{7.17}$$

$$\lim_{h\to 0}\|r_{2h}g\|_2 = \|g\|_2, \qquad \text{对任意 } g \in \mathcal{B}_2. \tag{7.18}$$

作为方程 (7.16) 的离散近似，考虑算子方程

$$L_h u_h = f_h, \tag{7.19}$$

其中 $L_h : \mathcal{B}_{1h} \to \mathcal{B}_{2h}$ 是算子 L 的某个近似. 令

$$R_h(u) = f_h - L_h(r_{1h}u). \tag{7.20}$$

如果 $\lim\limits_{h\to 0}\|R_h(u)\|_2 = 0$, 则称在 u 处离散方程 (7.19) 对于 (7.16) 的逼近是相容的， $R_h(u)$ 代表 (7.19) 的逼近 (截断) 误差.

再来讨论稳定性的概念和定义. 由于 (7.19) 是一个非线性的离散方程，如何恰当地定义它的稳定性是一个重要问题.

首先，仿照前节线性离散模型的稳定性定义 (见 (7.13) 式), 对于方程 (7.19) 的一种稳定性定义为：如果存在正常数 M_0 和 h_0, 使得当 $0 < h < h_0$ 时，

$$\begin{gathered}\|u_h^{(1)} - u_h^{(2)}\|_{1,h} \le M_0\|L_h u_h^{(1)} - L_h u_h^{(2)}\|_{2,h},\\ \forall\, u_h^{(1)}\ ,\ u_h^{(2)} \in \mathcal{B}_{1h}\end{gathered} \tag{7.21}$$

其中 $\|\cdot\|_{1,h}$ 和 $\|\cdot\|_{2,h}$ 分别是空间 $\mathcal{B}_{1h}$ 和 $\mathcal{B}_{2h}$ 中的某种范数，此时称格式 (7.19) 为稳定的. 另外， W. G. Strang([82], 1960) 还引进如下"弱稳定性"的定义：存在正常数 M_1 和 h_0, 使得当 $0 < h < h_0$ 时，

$$\begin{gathered}\|u_h^{(1)} - u_h^{(2)}\|_{1,h} \le M_1 h^{-q}\|L_h u_h^{(1)} - L_h u_h^{(2)}\|_{2,h},\\ \forall\, u_h^{(1)}\ ,\ u_h^{(2)} \in \mathcal{B}_{1h}\ ,\ q > 0.\end{gathered} \tag{7.22}$$

由不等式 (7.21) 或 (7.22) 所定义的稳定性或弱稳定性皆表征离散方程 (7.19) 的解对于方程右端的某种连续依赖性质. 同时, 我们看到在上述定义中, 无论解或者右端的变更、扰动均在 $\mathcal{B}_{1h}$ 或 $\mathcal{B}_{2h}$ 的全空间范围考虑的. 这种全局性的稳定性质对于非线性模型而言, 一般是很难满足的. 另一方面, 如果把目光集中到计算方程 (7.16) 的孤立解 $u \in \mathcal{B}_1$ 上面, 则有理由只考虑离散模型 (7.19) 在 $r_{1h}(u)$ 附近的稳定性质. 源于上述思想, H. J. Stetter([83]) 和郭本瑜在 1965 年前后独立地提出了非线性离散方程在孤立解附近的局部稳定性概念, 称之为广义稳定性, 郭本瑜还引进了 "稳定指数" 的概念 (见 [84]), 曾成功地应用于一些非线性偏微问题离散模型的理论分析.

广义稳定性定义 [84]: 如果存在 $N(u_h,h) > 0$ 和 $M(u_h,h) \geq 0$, 使得对任意 $u_h^{(l)} \in \mathcal{B}_{1h}$ $(l=1,2)$, 若

$$\|L_h u_h^{(l)} - L_h u_h\|_{2,h} \leq N(u_h,h) \tag{7.23}$$

则有

$$\|u_h^{(1)} - u_h^{(2)}\|_{1,h} \leq M(u_h,h)\,\|L_h u_h^{(1)} - L_h u_h^{(2)}\|_{2,h}. \tag{7.24}$$

此时, 称 **L_h 在 u_h 处是广义稳定的.**

容易看出, 如果 L_h 为线性算子, 则当

$$N(u_h,h) \geq N_0,\ M(u_h,h) = M_0 \qquad (N_0, M_0\text{正常数})$$

时, 由广义稳定性可推出稳定性.

假定 $N(u_h,h) = \overline{N}(u_h)h^p$, p 为正常数, 将使 (7.24) 成立的、出现在条件 (7.23) 中的最小正常数 p 称为 **稳定指数**, 记作 $s = \inf p$.

在一定条件下, 有广义稳定性可以推出离散方程解 u_h 的存在性.

引理 7.1 *假定如下条件成立:*

(i) L_h *在* $\mathcal{B}_{1h}$ *中球域* $R_1(v';r)$ *中有定义并且连续;*

(ii) *对任意* $v^{(l)} \in R_1(v';r), i=1,2$, *若* $L_h v^{(l)} \in R_2(L_h v';\widetilde{r})$ *则*

$$\|v^{(1)} - v^{(2)}\|_{1,h} \leq M\|L_h v^{(1)} - L_h v^{(2)}\|_{2,h},$$

其中 M *为正常数. 此时在球域* $R_2(L_h v';r_0)$ *中* L_h^{-1} *存在, 其中* $r_0 = \min\left(\widetilde{r}, \dfrac{r}{M}\right)$.

定理 7.2 *如果下列条件成立:*

(i) L_h *在球* $R_1(r_{1h}u,r)$ *中有定义并且连续;*

(ii) L_h *在* $r_{1h}u$ *处是广义稳定的;*

(iii) $\dim \mathcal{B}_{1h} = \dim \mathcal{B}_{2h}$;

(iv) $\|R_h(u)\|_{2,h} < r_0(h)$, *其中*

$$r_0(h) = \min\left(N(r_{1h}u,h)\ ,\ \frac{r}{M(r_{1h}u,h)}\right),$$

则离散方程 (7.19) 在 $r_{1h}u$ 附近存在惟一解.

证明 令 $v' = r_{1h}u$, $r_0 = r_0(h)$, 利用引理 7.1 知在球域 $R_2(L_h(r_{1h}u), r_0(h))$ 中 L_h^{-1} 存在. 又由假设 (iv),

$$\|f_h - L_h(r_{1h}u)\|_{2,h} < r_0(h),$$

从而 $f_h \in R_2(L_h(r_{1h}u), r_0(h))$, 可见离散方程 (7.19) 有解并且是惟一的.

下面定理给出由离散方程 (7.19) 所定义近似解为收敛 (当网格参数 $h \to 0$) 的一个充分条件.

定理 7.3 (收敛性定理) 假定下列条件成立:

(i) 当 h 充分小, (7.19) 有惟一解;

(ii) L_h 在 $r_{1h}u$ 处是广义稳定的;

(iii) $\|R_h(u)\|_{2,h} \le N(r_{1h}u, h)$, 并且

$$\lim_{h\to 0} M(r_{1h}u, h)\,\|R_h(u)\|_{2,h} = 0, \tag{7.25}$$

则

$$\lim_{h\to 0} \|u_h - r_{1h}u_h\|_{1,h} = 0. \tag{7.26}$$

证明 令 $u_h = r_{1h}u + \widetilde{u}_h$, 则有

$$L_h(r_{1h}u) = f_h - R_h(u)$$

和

$$L_h(r_{1h}u + \widetilde{u}_h) = f_h - R_h(u) + R_h(u).$$

由定理假设 (ii) 和 (iii), 可知

$$\|\widetilde{u}_h\|_{1,h} \le M(r_{1h}u, h)\,\|R_h(u)\|_{2,h} \to 0\ , \qquad 当\ h \to 0时,$$

即定理结论成立.

§7.3 应用例题

本节讨论一个非线性偏微分方程的离散模型, 用来说明如何应用 §7.2 中的理论、方法.

考虑非线性 Burger 方程的初边值问题:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + u\dfrac{\partial u}{\partial x} = \mu\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + g, \quad \mu > 0, \\ u(x+1, t) = u(x, t), \\ u(x, 0) = u^0(x) \quad (1周期函数). \end{cases} \tag{7.27}$$

现在用差分逼近方法来构造问题 (7.27) 的半离散模型 (空间变量离散化，时间变量保持连续). 作 x 轴上区间 $[0,1]$ 的剖分，节点集合为 $\{x_j=jh,\ j=0,1,\cdots,N\}$, $Nh=1$. 令 $U_j(t)$ 代表 $u(x_j,t)$ 的近似，由周期性有 $U_{j+N}(t)=U_j(t)$, 对所有 j. 对于定义在 $\{x_j\}_{j=0}^{N}$ 上的网格函数 U 和 V, 定义内积和范数

$$(U,V)_h=h\sum_{j=1}^{N}U_jV_j,\quad \|U\|_h=(U,U)_h^{\frac{1}{2}} \tag{7.28}$$

和引用差商记号

$$\begin{aligned}U_x&=\big[U(x+h,t)-U(x,t)\big]/h,\\ U_{\bar{x}}&=\big[U(x,t)-U(x-h,t)\big]/h,\\ U_{\hat{x}}&=\big[U(x+h,t)-U(x-h,t)\big]/2h,\\ U_{x\bar{x}}&=\big[U(x+h,t)-2U(x,t)+U(x-h,t)\big]/h^2.\end{aligned}$$

另外，引入记号

$$J(u,v)=\alpha v\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{1}{2}(1-\alpha)\frac{\partial(uv)}{\partial x},$$

其中 $\alpha\in[0,1]$ 是一个可以选择的参数. 对于任意网格函数 V, W, 定义

$$J(V,W)_j=\alpha W_jV_{\hat{x},j}+\frac{1}{2}(1-\alpha)(VW)_{\hat{x},j},\quad \text{于每一网点}x_j. \tag{7.29}$$

利用以上记号，问题 (7.27) 的一个半离散差分逼近为

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}U_j}{\mathrm{d}t}+J(U,U)_j=\mu U_{x\bar{x},j}+G_j,\quad j=1,2,\cdots,N,\\ U_j(0)=u^0(jh),\quad j=1,2,\cdots,N,\end{cases} \tag{7.30}$$

其中 $G_j(t)$ 是 $g(jh,t)$ 的某个近似.

容易验证 $J(U,U)$ 的下列表达式：

$$\begin{cases}\alpha=1: & U_jU_{\hat{x},j},\\ \alpha=\dfrac{1}{3}: & \dfrac{1}{3}(U_{j+1}+U_j+U_{j-1})U_{\hat{x},j},\\ \alpha=0: & \dfrac{1}{2}(U_{j+1}+U_{j-1})U_{\hat{x},j}.\end{cases} \tag{7.31}$$

下面先讨论格式 (7.30) 的稳定性.

假定 (7.30) 中的初值和源项受扰动之后为 $U_j(0)+\widetilde{U}_j(0)$ 和 $G_j+\widetilde{G}_j$, 相应的解记为 $U_j(t)+\widetilde{U}_j(t)$, 即有

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(U+\widetilde{U})_j+J(U+\widetilde{U},U+\widetilde{U})_j=\mu(U+\widetilde{U})_{x\bar{x},j}+(G+\widetilde{G})_j,\\ U_j(0)+\widetilde{U}_j(0)=u^0(jh)+\widetilde{u}^0(jh),\quad j=1,2,\cdots,N.\end{cases} \tag{7.32}$$

由 (7.32) 和 (7.30) 两式相减，可得

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}\widetilde{U}_j}{\mathrm{d}t} + J(\widetilde{U},\widetilde{U})_j + J(\widetilde{U},U)_j + J(U,\widetilde{U})_j = \mu\widetilde{U}_{x\bar{x},j} + \widetilde{G}_j, \\ \widetilde{U}_j(0) = \widetilde{u}^0(jh), \quad j = 1,2,\cdots,N. \end{cases} \tag{7.33}$$

将 (7.33) 的两端同乘以 $\widetilde{U}_j$, 然后再对 j 求和，经过系列估计和计算之后可得 (参考 [86] 中的推导)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\widetilde{U}\|_h^2 \le C\big(\|\widetilde{U}\|_h^2 + \varepsilon(\alpha)h^{-3}\|\widetilde{U}\|_h^4 + \|G\|_h^2\big), \tag{7.34}$$

其中

$$\varepsilon(\alpha) = \begin{cases} 0, & 当\alpha = \dfrac{1}{3}, \\ 1, & 当\alpha \ne \dfrac{1}{3}. \end{cases} \tag{7.35}$$

估计式右端的常数 C 依赖于 $\max\limits_j |U_{x,j}|$, 这里 U 是格式 (7.30) 的解. 由 (7.34) 可得出：当 $t \in [0,T]$,

$$\|\widetilde{U}(t)\|_h^2 \le \begin{cases} C\widetilde{\rho}e^{Ct}, & 当\alpha = \dfrac{1}{3}, \\ C\widetilde{\rho}e^{Ct}/\Delta, & 当\alpha \ne \dfrac{1}{3},\ \Delta > 0. \end{cases} \tag{7.36}$$

其中

$$\Delta = 1 - C\widetilde{\rho}h^{-3}(e^{Ct} - 1), \tag{7.37}$$

$$\widetilde{\rho} = \|\widetilde{u}^0\|^2 + \int_0^T \|\widetilde{G}(t)\|^2 \mathrm{d}t. \tag{7.38}$$

$\widetilde{\rho}$ 是扰动大小的一个度量.

由 (7.36) 可以看到，在 $\alpha = \dfrac{1}{3}$ 的情形，无论扰动 $\widetilde{U}^0, \widetilde{G}$ 的大小，格式 (7.30) 都是稳定的，其时相应的离散算子 L_h 是广义稳定的，且稳定指数 $s = -\infty$. 再看 $\alpha \ne \dfrac{1}{3}$ 的情形. 由表达式 (7.37) 看出，当时间变量 t 抵达由下式所确定的有限时刻 T^*

$$C\widetilde{\rho}h^{-3}(e^{CT^*} - 1) = 1, \tag{7.39}$$

估计式 (7.36) 右端的值升至无穷大 (blow-up). 因此，为了保证格式在时间区间 $[0,T]$ 内的稳定性，必需要求 $T < T^*$. 换句话说，要求扰动 $\widetilde{U}^0, \widetilde{G}$ 的大小不超过下述界限

$$\widetilde{\rho} < h^3/(e^{CT} - 1) \cdot C. \tag{7.40}$$

此式相当于广义稳定性定义中的限制条件 (7.23)，此种限制条件又称门槛条件 (threshold condition). 至此证明了 “当扰动 $\widetilde{U}^0, \widetilde{G}$ 满足 (7.40) 时，解的扰动 $\widetilde{U}(t)$ 满

足估计式 (7.10)". 换句话说，离散模型 (7.30) 是广义稳定的，并由 (7.40) 看出其稳定指数 $s \le \frac{3}{2}$.

最后讨论一下格式 (7.30) 的收敛性.

将格式 (7.30) 表示为

$$L_hU = f_h. \tag{7.41}$$

设 r_hu 代表在网格节点上与真解 u 取值相同的网格函数，并令 $U = r_hu + \widetilde{U}$, 则有

$$L_h(r_hu + \widetilde{U}) = f_h \tag{7.42}$$

和

$$L_h(r_hu) = f_h - R_h(u). \tag{7.43}$$

其中 $R_h(u) = f_h - L_h(r_hu)$ 是格式 (7.30) 的截断误差. 利用 Taylor 展开，不难证明 $R_h(u) = O(h^2)$.

沿用前面关于稳定性的推导、分析，将 (7.42) 视为 (7.43) 的扰动方程，可知：当门槛条件

$$\|R_h(u)\| \le \overline{N}(r_hu)h^s, \quad s \le \frac{3}{2}, \tag{7.44}$$

满足时，便有估计式

$$\|U - r_hU\|_h = \|\widetilde{U}\|_h \le M(r_hu)\|R_h(u)\|. \tag{7.45}$$

已知 $\|R_h(u)\| = O(h^2)$, 而稳定指数 $s < 2$, 所以当 h 充分小时条件 (7.44) 总是满足的. 此外，因 r_hu 是真解 u 在网格上的限制，有理由假定 (7.44) 、 (7.45) 中的 $\overline{N}(r_hu)$ 和 $M(r_hu)$ 都是关于 h 一致有界的，由此证得

$$\|U - r_hu\|_h \to 0, \quad 当h \to 0.$$

即近似解 U 按范数 $\|\cdot\|_h$ 收敛到真解 u, 并由 (7.45) 可得误差估计

$$\|U - r_hu\|_h \le M(r_hu)\|R_h(u)\| = O(h^2). \tag{7.46}$$

参考文献

[1] P. G. Ciarlet. The Finite Element Method for Elliptic Problems. Amsterdam: North-Holland Public Company, 1978

[2] V. Thomée. Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems. 见：Lect. Notes in Meth.. Springer-Verlag, 1984
中译本：抛物问题 Galerkin 有限元法. 黄明游、刘海楼译. 吉林大学出版社，1986

[3] 李荣华. 解边值问题的迦辽金方法. 上海：上海科学技术出版社，1988

[4] 李大潜，陈韵梅. 非线性发展方程. 北京：科学出版社，1997

[5] 王明新. 非线性抛物方程. 北京：科学出版社，1993

[6] 黄明游. 发展方程的有限元方法. 上海：上海科学技术出版社，1988

[7] M. Y. Huang, V. Thomée. Some convergence estimates for semidiscrete type schemes for time-dependent nonselfadjoint parabolic equations. Math. Comp., 1981(37): 327~346

[8] I. Babuška, The finite element method with Lagrangian multipliers. Numer. Math., 1973(20): 179~192

[9] A. Berger, R. Scott, G. Strang. Approximate boundary condition in the finite element method. Symposia Mathematica X, New York: Academic Press, 1972, 259~313

[10] J. H. Nitsche, Über ein Variationsprinzip zur Lösung von Dirichlet Problemen bei Verwendung von Teilräumen die keinen Randbedingungen unterworfen sind. Abh. Sem. Univ. Hamburg, 1971(V.36): 9~15

[11] I, Babuška, M. Zlamal. Nonconforming elements in the finite element method with penalty. SIAM J. Numer. Anal., 1973(10): 863~875

[12] G. A. Baker, J. H. Bramble, V. Thomée. Single step Galerkin approximations for parabolic problems. Math. Comput., 1977(31): 818~847

[13] J. H. Bramble, P. H. Sammon. Efficient higher order single step methods for parabolic problems: Part I. Math. Comp., 1980(35): 655~677

[14] P. Brenner, M. Crouzeix, V. Thomée. Single step methods for inhomogeneous linear differential equations in Banach space. RAIRO, Anal. Numer., 1982(16): 5~26

[15] M. Y. Huang, V. Thomée. On the backward Euler method for parabolic equations with rough initial data. SIAM J. Numer. Anal., 1982(19): 599~603

[16] K. Eriksson, C. Johnson, V. Thomée. Time discretization of parabolic problems by the discontinuous Galerkin method, RAIRO. Math. Anal., 1985(19): 611~643

[17] 李荣华，陈仲英. 微分方程的广义差分法. 长春：吉林大学出版社，1994
英文版：Generalized Difference Methods for Differential Equations. Marcel Dekker Inc., Pure and Applied Mathematics, 226, 2000

[18] Z. Cai, J. Mandel, S. McCormick. The finite volume element methods for diffusion equations on general triangulations. SIAM J. Numer. Anal., 1991(28): 392~402

[19] R. D. Lazarov, I. D. Mishev, D. S. Vassileveski. Finite volume methods for convection-diffusion problems. SIAM J. Numer. Anal., 1996(33): 31~55

[20] J. Douglas, Jr. and T. F. Russell. Numerical methods for convection-dominated diffusion problems based on combining the method of characteristics with finite element or finite difference procedures. SIAM J. Numer. Anal., 1982(19, 5): 871~885

[21] P. A. Raviart and J. M. Thomas. A mixed finite element method for 2*nd* order elliptic problems, Proc. of the Symposium on the Mathematical Aspects of FEM, Springer Lecture Notes in Math., 1977(606): 292~315

[22] R. E. Ewing, T. F. Russell and M. F. Wheeler. Convergence analysis of an approximation of missible displacement in porous medium by a mixed method and a modified method of characteristics. Computer Method in Applied Mechanics and Engineering, 1984(45)

[23] R. E. Ewing, Y. R. Yuan and G. Li. Time stepping alone characteristics for a mixed finite element approximation for compressible flow of contamination from nuclear waste in porous medium. SIAM J. Numer. Anal., 1989, (26): 1513~1524

[24] 袁益让. 三维热传导型半导体问题的差分方法和分析. 中国科学, A., 1993, 11(26): 978~983

[25] T. J. R. Hughes and A. Brooks. A multidimensional upwind schemes with no-crosswind diffusion. AMD, 1979, (34)

[26] K. Eriksson and C. Johnson. Adaptive Streamline diffusion F. E. M. for stationary convection-diffusion problems. Math. of Comput., 1993, (60): 167~188

[27] C. Sun and H. Shen. FDSD method for time-dependent convection-diffusion equations. Numer. Math., A J. of Chinese Univ., 1998, 1(7): 72~85

[28] M. Tabata. A finite element approximation corresponding to the upwind finite differencing. Memoirs of Numer. Math., 1977, (4): 47~63

[29] 胡健伟, 田春松. 对流扩散问题的 Galerkin 部分迎风有限元法. 计算数学, 1992, 14(4): 446~459

[30] T. Dupont. L^2-estimates for Galerkin methods for second order hyperbolic equations. SIAM J. Numer. Anal., 1973, (10): 880~889

[31] G. A. Baker. Error estimates for finite element methods for second order hyperbolic equations. SIAM J. Numer. Anal., 1976, (13): 564~576

[32] 郭本瑜. 偏微分方程的差分方法. 北京: 科学出版社, 1988

[33] 应隆安, 滕振寰. 双曲型守恒律方程及其差分方法. 北京: 科学出版社, 1991

[34] W. H. Reed and T. R. Hill. Triangular mesh methods for the neutron transport equation. Tech. Report LA-UR-73-749, Los Alamos Scientific Laboratory, 1973

[35] P. Lesaint and P. A. Raviart. On a finite element method for solving the neutron transport equation. Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations, C. de Boor ed., Academic Press, 1974, 89~145

[36] C. Johnson, U. Navert and J. Pitkäranta. Finite element methods for linear hyperbolic problems. Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 1984, (45): 285~312

[37] M. Y. Huang. On the generalized upwind scheme for the neutron transport equation. J. of Mathematical research and exposition, 1985, 5(4): 63~65

[38] M. Y. Huang. A finite element approximation of upwind type to the vorticity transport equations in bounded domain. Northeast. Math. J., 1985, 1(2): 197~205

[39] C. Johnson and J. Pitkäranta. An analysis of the discontinuous Galerkin method for a scalar hyperbolic equation. Math. Comp., 1986, 46: 1~26

[40] M. Y. Huang. Stability and convergence analysis for box scheme for first order hyperbolic systems. Proceedings of the China-France Symposium on F.E.M.,Ed. by K. Feng and J. L. Lions, 1983, 696~731

[41] B. Cockburn and C. W. Shu. TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for scalar conservation laws II: general framework. Math. Comp., 1989, (52): 411~435

[42] B. Cockburn, S. Y. Lin and C. W. Shu. TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws III: one dimensional systems. J. Comput. Phys., 1989, (84): 90～113

[43] G. Jiang and C. W. Shu. On cell entropy inequality for discontinuous Galerkin methods. Math. Comp., 1994, (62): 531～538

[44] 邵秀民, 蓝志凌. 流体和多孔介质波动方程的有限元解法. 地球物理学报, 2000, (2): 264～278

[45] 黄明游, 王雪芳. 关于半离散 *Galerkin* 近似解的 L^∞ 估计的一个注记. 高等学校计算数学学报, 1984, (4): 376～379

[46] B. Engquist and A. Majda. Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves. Math. Comp., 1977, (31): 629～651

[47] L. Halpern and L. N. Trefethen. Wide-angle one way wave equations. J. Acoustic. Soc. Am., 1988, (84): 1397～1404

[48] R. L. Higdon. Numerical absorbing boundary conditions for the wave equation. Math. Comp., 1987, (49): 65～90

[49] B. Van Leer. Towards the ultimate conservation difference scheme. II, J. Comput. Phys., 1979, (14): 1～136

[50] S. Osher. Convergence of generalized MUSCL schemes. SIAM J. Numer. Anal., 1985, (22): 947～961

[51] C. W. Shu. TVB uniformly high order schemes for conservation laws. Math. Comp., 1987, (49): 105～121

[52] M. Y. Huang. On discontinuous finite element approximation for the Tricomi's problem. J. Comp. Math., 1985, 3(4): 289～297

[53] 张铁. 一阶双曲方程组间断有限元方法. 东北工学院学报, 1987, (2): 250～257

[54] C. Canuto and A. Quarteroni. Approximation results for orthogonal polynomials in Sobolev spaces. Math. Comp., 1982, (38): 67～86

[55] B. Y. Guo. The convergence of the spectral scheme for solving two-dimensional vorticity equations. J. Comput. Math., 1983, 1(4): 353～362

[56] 刘播, 黄明游. 一些非线性发展方程的 Fourier 方法. 高等学校计算数学学报, 1987, 9(2): 119～133

[57] Y. Maday and Tadmor. Analysis of the spectral vanishing method for periodic conservation laws. SIAM J. Numer. Anal., 1989, (26): 854～870

[58] H. P. Ma. Chebyshev-Legendre viscosity method for nonlinear consevation laws. SIAM J. Numer. Anal., 1998, (35): 869～892

[59] M. Y. Huang, T. Küpper and N. Masbaum. Computation of invariant tori by the Fourier methods. SIAM J. Sci. Comput., 1997, (18): 918～942

[60] B. Y. Guo, Spectral Methods and Their Applications. Singapore: World Scientific. 1998

[61] 向新民. 谱方法的数值分析. 北京, 科学出版社, 2000

[62] L. Dieci, J. Lorenz and D. Russell. Numerical calculation of invariant tori. SIAM J. Sci. Statist. Comput., 1991, (12): 607～647

[63] B. Y. Guo. Gegenbauer approximations and its applications to differential equations on the whole line. J. Math. Anal. Appl., 1998, (226): 180～206

[64] W. Cia, D. Gottlieb and C. W. Shu. Essentially non-oscillatory spectral Fourier method for shock wave calculations. Math. Comp., 1989, (52): 389～410

[65] V. I. Arnold. Mathematical Methods of Classical Mechanics. Springer-Verlag, 1978

[66] K. Feng, On difference schemes and symplectic geometry. Proc. 1984 Beijing Symposium on Differential Geometry and Differential Equations (Feng Kang, ed.), Beijing: Science Press, 1985,

42~58

[67] K. Feng. Difference schemes of Hamiltonian systems & symplectic geometry. J. Comput. Math., 1986, (4): 279~289

[68] K. Feng and M. Z. Qin. The symplectic methods for the computation of Hamiltonian equations. Lecture Notes in Math., Proceedings 1297, Springer-Verlag, 1987, 1~37

[69] M. Y. Huang. A Hamiltonian approximation for nonlinear wave equation on S^n. Lecture Notes in Math., Proceedings 1297, Springer-Verlag, 1987, 50~60

[70] M. Y. Huang. A Hamiltonian approximation to simulate solitary waves of the Korteweg-de Vries equation. Math. Comp., 1991, (56): 607~620

[71] R. I. Mclachlan. Symplectic integration of Hamiltonian wave equations. Numer. Math., 1994, (66): 465~492

[72] J. M. Sanz-Serna and M. P. Calvo. Numerical Hamiltonian systemes. London: Chapman & Hall, 1994

[73] J. E. Marsden. G. P. Patrick and S. Shkoller. Multi-symplectic geometry, variational integrators and nonlinear PDEs, Comm. Math. Phys., 1999, (199): 351~395

[74] S. Reich. Multi-symplectic Runge-Kutta collocation methods for Hamiltonian wave equations. Dept. of Math. and Stat., Univ. of Surrey, Guildford, GU2 5XH, May6, 1999

[75] M. Y. Huang, R. Qu and C. C. Gong. A structure-preserving discretization of nonlinear Schrödinger equation. J. Comput. Math., 1999, (17): 553~560

[76] 宫成春. 薛定谔方程的数值计算与含色散补偿光纤模型动力行为的数值模拟. 吉林大学博士学位论文, 2002

[77] P. D. Lax. Integrals of nonlinear equations of evolution and solitary waves. Comm. Pure Appl. Math., 1968, (21)

[78] R. Winther. A conservation finite element method for the Koteweg de Vries equation. Math. Comp., 1980, (34): 23~43

[79] N. J. Zabusky and M. D. Kruskal. Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. Phys. Rev. Lett., 1965, (15): 240~243

[80] R. Courant, K. O. Friedrichs and H. Lewy. Überdie partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik. Math. Annl., 1928, (100): 32~74

[81] R. D. Richtmyer and K. W. Morton. Finite Difference Methods for Initial-value Problem. 2'nd edition, New York: Interscience, 1967

[82] G. Strang. Difference methods for mixed boundary-value problems. Duke Math. J., 1960, (27): 211~230

[83] H. J. Stetter. Stability of nonlinear discretization algorithms. in Numerical Solutions of Partial Differential Equations, ed. by J. Bramble, New York: Academic Press, 1966, 111~123

[84] B. Y. Guo. On stability of discretization. Scientia Sinica, 1985, A(25): 702~715

[85] B. Y. Guo. Numerical approximation of isolated solution, Proc. of DD5. ed. by Feng Kang, Beijing: Science Press, 1985

[86] B. Y. Guo and J. M. Sanz-Serna. Convergence of methods for numerical solution of the Korteweg de Vries equation, IMAJ Num. Anal., 1981, (1): 215~222

[87] D. F. Griffiths. The stability of finite difference approximations to nonlinear partial differential equations. Bulletin of The Institute of Math. and Appl., 1982, (18): 210~215

《现代数学基础丛书》出版书目

（按出版时间排序）

1 数理逻辑基础（上册） 1981.1 胡世华、陆钟万 著
2 紧黎曼曲面引论 1981.3 伍鸿熙、吕以辇、陈志华 著
3 组合论（上册） 1981.10 柯召、魏万迪 著
4 数理统计引论 1981.11 陈希孺 著
5 多元统计分析引论 1982.6 张尧庭、方开泰 著
6 概率论基础 1982.8 严士健、王隽骧、刘秀芳 著
7 数理逻辑基础（下册） 1982.8 胡世华、陆钟万 著
8 有限群构造（上册） 1982.11 张远达 著
9 有限群构造（下册） 1982.12 张远达 著
10 环与代数 1983.3 刘绍学 著
11 测度论基础 1983.9 朱成熹 著
12 分析概率论 1984.4 胡迪鹤 著
13 巴拿赫空间引论 1984.8 定光桂 著
14 微分方程定性理论 1985.5 张芷芬、丁同仁、黄文灶、董镇喜 著
15 傅里叶积分算子理论及其应用 1985.9 仇庆久等 编
16 辛几何引论 1986.3 J.柯歇尔、邹异明 著
17 概率论基础和随机过程 1986.6 王寿仁 著
18 算子代数 1986.6 李炳仁 著
19 线性偏微分算子引论（上册） 1986.8 齐民友 著
20 实用微分几何引论 1986.11 苏步青等 著
21 微分动力系统原理 1987.2 张筑生 著
22 线性代数群表示导论（上册） 1987.2 曹锡华等 著
23 模型论基础 1987.8 王世强 著
24 递归论 1987.11 莫绍揆 著
25 有限群导引(上) 1987.12 徐明曜 著
26 组合论（下册） 1987.12 柯召、魏万迪 著
27 拟共形映射及其在黎曼曲面论中的应用 1988.1 李忠 著
28 代数体函数与常微分方程 1988.2 何育赞 著
29 同调代数 1988.2 周伯壎 著
30 近代调和分析方法及其应用 1988.6 韩永生 著

31 带有时滞的动力系统的稳定性 1989.10 秦元勋等 编著
32 代数拓扑与示性类 1989.11 马德森著 吴英青、段海鲍译
33 非线性发展方程 1989.12 李大潜、陈韵梅 著
34 反应扩散方程引论 1990.2 叶其孝等 著
35 仿微分算子引论 1990.2 陈恕行等 编
36 公理集合论导引 1991.1 张锦文 著
37 解析数论基础 1991.2 潘承洞等 著
38 拓扑群引论 1991.3 黎景辉、冯绪宁 著
39 二阶椭圆型方程与椭圆型方程组 1991.4 陈亚浙、吴兰成 著
40 黎曼曲面 1991.4 吕以辇、张学莲 著
41 线性偏微分算子引论（下册） 1992.1 齐民友 著
42 复变函数逼近论 1992.3 沈燮昌 著
43 Banach 代数 1992.11 李炳仁 著
44 随机点过程及其应用 1992.12 邓永录等 著
45 丢番图逼近引论 1993.4 朱尧辰等 著
46 线性微分方程的非线性扰动 1994.2 徐登洲 马如云 著
47 广义哈密顿系统理论及其应用 1994.12 李继彬、赵晓华、刘正荣 著
48 线性整数规划的数学基础 1995.2 马仲蕃 著
49 单复变函数论中的几个论题 1995.8 庄圻泰 著
50 复解析动力系统 1995.10 吕以辇 著
51 组合矩阵论 1996.3 柳柏濂 著
52 Banach 空间中的非线性逼近理论 1997.5 徐士英、李冲、杨文善 著
53 有限典型群子空间轨道生成的格 1997.6 万哲先、霍元极 著
54 实分析导论 1998.2 丁传松等 著
55 对称性分岔理论基础 1998.3 唐云 著
56 Gel'fond-Baker 方法在丢番图方程中的应用 1998.10 乐茂华 著
57 半群的 S-系理论 1999.2 刘仲奎 著
58 有限群导引(下) 1999.5 徐明曜等 著
59 随机模型的密度演化方法 1999.6 史定华 著
60 非线性偏微分复方程 1999.6 闻国椿 著
61 复合算子理论 1999.8 徐宪民 著
62 离散鞅及其应用 1999.9 史及民 编著
63 调和分析及其在偏微分方程中的应用 1999.10 苗长兴 著
64 惯性流形与近似惯性流形 2000.1 戴正德、郭柏灵 著
65 数学规划导论 2000.6 徐增堃 著
66 拓扑空间中的反例 2000.6 汪林、杨富春 编著

67 拓扑空间论 2000.7 高国士 著
68 非经典数理逻辑与近似推理 2000.9 王国俊 著
69 序半群引论 2001.1 谢祥云 著
70 动力系统的定性与分支理论 2001.2 罗定军、张祥、董梅芳 编著
71 随机分析学基础 （第二版） 2001.3 黄志远 著
72 非线性动力系统分析引论 2001.9 盛昭瀚、马军海 著
73 高斯过程的样本轨道性质 2001.11 林正炎、陆传荣、张立新 著
74 数组合地图论 2001.11 刘彦佩 著
75 光滑映射的奇点理论 2002.1 李养成 著
76 动力系统的周期解与分支理论 2002.4 韩茂安 著
77 神经动力学模型方法和应用 2002.4 阮炯、顾凡及、蔡志杰 编著
78 同调论——代数拓扑之一 2002.7 沈信耀 著
79 金兹堡-朗道方程 2002.8 郭柏灵等 著
80 排队论基础 2002.10 孙荣恒、李建平 著
81 算子代数上线性映射引论 2002.12 侯晋川、崔建莲 著
82 微分方法中的变分方法 2003.2 陆文端 著
83 周期小波及其应用 2003.3 彭思龙、李登峰、谌秋辉 著
84 集值分析 2003.8 李雷 吴从炘 著
85 数理逻辑引论与归结原理 2003.8 王国俊 著
86 强偏差定理与分析方法 2003.8 刘文 著
87 椭圆与抛物型方程引论 2003.9 伍卓群、尹景学
88 有限典型群子空间轨道生成的格（第二版） 2003.10 万哲先、霍元极 著
89 调和分析及其在偏微分方程中的应用（第二版） 2004.3 苗长兴 著
90 稳定性和单纯性理论 2004.6 史念东 著
91 发展方程数值计算方法 2004.6 黄明游 编著

